



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**ESTUDIO DE LA FOTOLUMINISCENCIA EN UN DISPOSITIVO
NANOESTRUCTURADO FORMADO POR PUNTOS CUÁNTICOS DE
SILICIO Y NANOPARTÍCULAS DE PLATA.**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

QUÍMICA

P R E S E N T A

TANIA GEORGINA NÚÑEZ VELÁZQUEZ



MÉXICO, D.F.

AÑO 2013



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: LETICIA MA. DE LOS ANGELES GONZALEZ ARREDONDO

VOCAL: MARIA DE LOS ANGELES PATRICIA OLVERA TREVIÑO

SECRETARIO: ALEJANDRA LOPEZ SUAREZ

1er. SUPLENTE: ALBERTO ALVAREZ ESPINDOLA

2° SUPLENTE: LUIS MIGUEL RIVERA CHAVEZ

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

INSTITUTO DE FÍSICA UNAM.

ASESOR DEL TEMA: DRA. ALEJANDRA LÓPEZ SUÁREZ _____

SUSTENTANTE: TANIA GEORGINA NÚÑEZ VELÁZQUEZ _____

Índice

Resumen.....	11
1. Introducción.....	13
2. Planteamiento del problema.....	18
2.1 Limitaciones del silicio para aplicaciones en optoelectrónica.....	19
2.2 Nanopartículas de silicio y nanopartículas metálicas.....	21
2.3 Fotoluminiscencia.....	22
3. Desarrollo teórico.....	26
3.1 Silicio nanoestructurado.....	26
3.1.1 Silicio en bulto.....	27
3.1.2 Silicio como semiconductor.....	30
3.1.3 Nanocristales de silicio.....	32
3.2 Implantación iónica.....	35
3.2.1 Efectos de la radiación en la materia.....	39
3.2.2 Procesos principales de la interacción radiación – materia.....	39
3.2.3 Interacción de iones positivos con la materia.....	40
3.2.4 Trayectoria y alcance.....	42
3.2.5 Defectos en la estructura cristalina.....	44
3.3 Retrodispersión de Rutherford (RBS).....	51
3.3.1 Fundamentos de la espectroscopía RBS (Rutherford Backscattering <i>Spectrometry</i>).....	51
3.3.2 Análisis de muestras.....	56
3.3.3 Secciones no Rutherford.....	59
3.4 Fotoluminiscencia.....	60
3.4.1 Fotoluminiscencia en semiconductores.....	62

3.5 Plasmón de Resonancia.....	64
4. Desarrollo experimental.....	71
4.1 Acelerador Pelletron.....	71
4.2 Preparación de las muestras.....	73
4.2.1 Experimento de implantación iónica.....	73
4.2.2 Tratamiento térmico.....	76
4.3 Caracterización.....	79
4.3.1 Retrodispersión de Rutherford.....	79
4.3.2 Fotoluminiscencia.....	81
5. Resultados.....	85
5.1 Presentación de resultados y análisis de resultados.....	85
5.1.1 Simulaciones con SRIM (TRIM).....	85
5.1.2 Espectros RBS.....	93
5.1.3 Fotoluminiscencia.....	106
6. Conclusiones.....	111
Apéndices	
Apéndice 1: Manejo del programa de simulación SRIM (TRIM).....	113
Apéndice 2: Manejo de programa de simulación SIMNRA.....	119
Apéndice 3: Análisis de resultados RBS.....	127
Apéndice 4: Análisis de resultados de fotoluminiscencia.....	130

Índice de tablas

Tabla 3.1.1. Propiedades físicas y químicas del silicio.....	27
Tabla 4.2.1.1. Implantación de iones de plata en un sustrato de dióxido de silicio.....	75
Tabla 5.1.1. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV.....	85
Tabla 5.1.2. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 1 MeV.....	86
Tabla 5.1.3. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 3 MeV.....	87
Tabla 5.1.4. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 1 y 3 MeV.....	88
Tabla A3.1. Cálculo del perfil de concentración para la muestra irradiada con iones de plata a 1 MeV.....	128
Tabla A4.1. Respuesta óptica del blanco en la región de 380 nm.....	132

Índice de figuras

Figura 2.1.1. Energía de transición de la banda prohibida en función del tamaño para nanopartículas de silicio confinadas en una, dos y tres dimensiones.....	20
Figura 3.1.2.1. Arreglo espacial de un cristal de silicio.....	28
Figura 3.1.2.2. Número de coordinación para un átomo de silicio.....	28
Figura 3.1.2.3. Ubicación de los huecos octaédricos en la celda unitaria del silicio.....	29
Figura 3.1.2.4. Ubicación de los huecos tetraédricos en la celda unitaria del silicio.....	29
Figura 3.1.3.1. Esquema de bandas para un semiconductor, ocupación de niveles de energía.....	30
Figura 3.1.3.2. Relación de la energía (E) en función del vector de onda (K) para el silicio.....	31
Figura 3.1.3.3. Gráficas de densidad de estados en función de la energía para un semiconductor en bulto y los tres tipos de confinamiento cuántico.....	34
Figura 3.2.1. Arreglo experimental para la implantación de iones.....	38
Figura 3.2.4. Trayectoria típica de un ion pesado en un material. Se observa la diferencia entre el frenado electrónico al inicio de su trayectoria y el frenado nuclear al final de ella.....	43
Figura 3.2.4.2. Forma de cascada de desplazamientos.....	44
Figura 3.2.5.1. Defectos producidos dentro de una red cristalina.....	45
Figura 3.2.5.2. Simulación utilizando el programa SRIM para iones de carbono implantados en carbono sólido a diferentes energías de implantación: (a) 0.1 MeV, (b) 1 MeV y (c) 3 MeV.....	47
Figura 3.2.5.3. Simulación utilizando el programa SRIM para iones de plata implantados a 3 MeV en diferentes materiales: (a) cuarzo, (b) acero inoxidable y (c) policarbonato.....	48

Figura 3.2.5.4. Simulación utilizando el programa SRIM para diferentes iones implantados a 1 MeV en cuarzo: (a) hidrógeno, (b) galio y (c) plata.....	49
Figura 3.3.1.1. Diagrama para calcular el factor cinemático de dispersión en un experimento RBS.....	52
Figura 3.3.1.2. Experimento de dispersión. Definición de sección eficaz.....	54
Figura 3.3.2.1. Geometría y espectro RBS correspondiente a un blanco grueso.....	57
Figura 3.3.2.2. Geometría de un experimento RBS y su espectro de una película delgada compuesta por dos elementos A y B sobre un sustrato C más ligero.....	58
Figura 3.4.1. Esquema de los procesos básicos que intervienen en un proceso de luminiscencia típica en semiconductores.....	61
Figura 3.5.1. Esquema de la oscilación del plasmón de una nanopartícula esférica que muestra el desplazamiento de la nube de electrones de conducción con respecto al núcleo.....	65
Figura 4.1.1. Esquema del acelerador Pelletron del Instituto de Física de la UNAM.....	71
Figura 4.1.2. Esquema del <i>Stripper</i> del acelerador Pelletron. Instituto de Física UNAM.....	72
Figura 4.2.1.2. Fotografía de (a) el portamuestra y (b) la cámara de implantación de iones del acelerador Pelletron IFUNAM.....	76
Figura 4.2.2.1. Fotografía del horno utilizado en el tratamiento térmico.....	77
Figura 4.2.2.2. Esquema del sistema de calentamiento para tratamiento térmico.....	78
Figura 4.3.1.1. Fotografía de la cámara de análisis del acelerador Pelletron IFUNAM.....	79
Figura 4.3.1.2. Vista esquemática de la cámara de análisis, en el experimento de RBS, del acelerador Pelletron IFUNAM.....	80
Figura 4.3.2.1. Experimento de medición de fotoluminiscencia.....	82
Figura 4.3.2.2. Espectro de emisión de fotoluminiscencia.....	83

Figura 5.1.1. Trayectoria de irradiación de iones de Si en SiO ₂ con una energía de 5 MeV.....	90
Figura 5.1.2. Distribución de iones de Si irradiados con una energía de 5 MeV en SiO ₂	90
Figura 5.1.3. Trayectoria de irradiación de iones de Ag en SiO ₂ con una energía de 1 MeV.....	90
Figura 5.1.4. Distribución de iones de Ag irradiados a 1 MeV en SiO ₂ , previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.....	90
Figura 5.1.5. Trayectoria de irradiación de iones de Ag en SiO ₂ con una energía de 3 MeV.....	91
Figura 5.1.6. Distribución de iones de Ag irradiados a 3 MeV, en SiO ₂ previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.....	91
Figura 5.1.7. Trayectoria de irradiación de iones de plata en SiO ₂ con una energía de 1 y 3 MeV.....	92
Figura 5.1.8. Distribución de iones de Ag irradiados a 1 y 3 MeV en SiO ₂ , previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.....	92
Figura 5.1.2.1. Espectro RBS para un sustrato de SiO ₂ implantado con iones de Si a 5 MeV.....	94
Figura 5.1.2.2. Espectro RBS para un sustrato de SiO ₂ implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 1 MeV.....	95
Figura 5.1.2.3. Espectro RBS para un sustrato de SiO ₂ implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 3 MeV.....	96
Figura 5.1.2.4. Espectro RBS para un sustrato de SiO ₂ implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 1 y 3 MeV.....	97
Figura 5.1.2.5. Distribución de átomos de Ag implantados a 1 MeV en función de la profundidad de implantación en dióxido de silicio en (a) capas atómicas, y (b) micras.....	99
Figura 5.1.2.6. Distribución de los átomos de Ag implantados a 3 MeV en función de la profundidad de implantación en un sustrato de dióxido de silicio en (a) capas atómicas, y (b) micras.....	101

Figura 5.1.2.7. Distribución de átomos de Ag implantados a 1 y 3 MeV en función de la profundidad de implantación en un sustrato de dióxido de silicio en (a) capas atómicas, y (b) micras.....	103
Figura 5.1.3.1. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) del blanco en función de la longitud de onda en nanómetros. La señal corresponde a la muestra con Si implantado a 5 MeV en dióxido de silicio.....	106
Figura 5.1.3.2. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) de la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV en función de la longitud de onda en nanómetros.....	107
Figura 5.1.3.3. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) de la muestra implantada con iones de plata a 3 MeV en función de la longitud de onda en nanómetros.....	108
Figura 5.1.3.4. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) de la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV en función de la longitud de onda en nanómetros.....	109
Figura A1.1. Ventana de inicio del programa SRIM (TRIM) en donde se establecen las condiciones para la simulación.....	113
Figura A1.2. Ventana de inicio del programa SRIM (TRIM) con las condiciones establecidas para la simulación.....	116
Figura A1.3. Avance de simulación. Gráfico que muestra la trayectoria y el alcance de los iones dentro del material.....	117
Figura A1.4. Avance de simulación. Gráfico que muestra la distribución de los iones en función de la profundidad de éstos en el material.....	117
Figura A1.5. Simulación de implantación de iones de plata dentro del material implantado previamente con iones de silicio.....	118
Figura A1.6. Gráfica de distribución de iones en función de la profundidad de implantación en el material.....	119
Figura A2.1. Espectro RBS para dióxido de silicio.....	121
Figura A2.2. Espectro RBS para dióxido de silicio, condiciones experimentales y energía del ion retrodisperso.....	122
Figura A2.3. Espectro RBS para dióxido de silicio, determinación del número de canal.....	123

Figura A2.4. Espectro RBS para dióxido de silicio, condiciones de calibración.....	124
Figura A2.5. Espectro RBS para dióxido de silicio, establecimiento de composición teórica de cada elemento en la muestra.....	125
Figura A2.6. Espectro RBS para dióxido de silicio, selección de las reacciones nucleares del ion incidente con los elementos de la muestra.....	126
Figura A2.7. Espectro RBS para dióxido de silicio. Espectro teórico simulado (línea continua).....	127
Figura A3.1. Gráfica de cantidad de plata en (a) átomos por unidad de área y (b) porcentaje atómico.....	130
Figura A4.1. Respuesta óptica en función de la longitud de onda para el blanco: Si 5 MeV en dióxido de silicio.....	133

Resumen

El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre. Es el material más utilizado en la elaboración de dispositivos electrónicos debido a sus propiedades fisicoquímicas, abundancia y fácil procesamiento para fabricar circuitos integrados. Sin embargo, el material en bulto es considerado inadecuado para aplicaciones optoelectrónicas, ya que es un semiconductor de banda prohibida indirecta, lo que limita su eficacia como emisor de luz visible. Al disminuir el tamaño de la partícula, se restringe el movimiento en una, dos o tres dimensiones en los portadores de carga (electrones y huecos) generando pozos, alambres o puntos cuánticos respectivamente; se genera un cambio en la densidad de estados, cambia la estructura de la banda de conducción y la de valencia, por lo que aumenta hasta tres veces la energía de transición de la banda prohibida, mejorando significativamente la respuesta óptica.

En este trabajo de tesis se propone estudiar la respuesta óptica de un material semiconductor de dióxido de silicio por medio de la formación de nanopartículas de silicio y plata mediante el método de implantación iónica.

Para llevar a cabo la implantación de iones se utilizó el acelerador Pelletron ubicado en el Instituto de Física de la UNAM. La determinación de la densidad areal de las nanopartículas implantadas en la muestra se llevó a cabo utilizando la técnica nuclear RBS (Retrodispersión de Rutherford); mientras que la respuesta óptica se midió utilizando un láser de Kr-F.

En una placa de dióxido de silicio de alta pureza se implantaron iones de silicio, posteriormente la placa se dividió en tres muestras, las cuales fueron implantadas con iones de plata a diferentes energías: 1 MeV, 3 MeV y 1 y 3 MeV. Al terminar la implantación, las muestras se sometieron a un tratamiento térmico en una atmósfera reductora para formar las nanopartículas de silicio y plata.

Los resultados de RBS muestran que las nanopartículas de plata implantadas con una energía de 3MeV alcanzaron una profundidad dentro de la muestra de 1.3 μm ; mientras que la plata implantada a 1MeV alcanzó una profundidad de 0.4 μm ,

y para la muestra implantada con plata a 1 y 3 MeV se obtuvo una concentración de nanopartículas cerca de la superficie, a 0.5 μm , y otra a 1.4 μm .

Por otra parte, tanto la muestra implantada con plata a 3 MeV como la implantada a dos energías (1 y 3 MeV), presentaron un aumento de respuesta óptica en comparación con la muestra implantada con plata a 1 MeV.

Introducción

Desde la antigüedad y en base a un conocimiento empírico, se ha llevado a cabo la síntesis de materiales formados por nanopartículas metálicas embebidas dentro de una matriz; esto con el objetivo de proporcionar diversas coloraciones en vidrios y cerámicas, pues las nanopartículas metálicas exhiben propiedades ópticas muy peculiares. Se han encontrado vidrios rojos que datan de la Edad de Bronce constituidos por nanopartículas de cobre; pero no fue hasta principios del siglo XX (1908) que Gustav Mie explicó la naturaleza de estas coloraciones con ayuda de la ecuación de Maxwell. Su teoría se basa en describir la interacción de las ondas electromagnéticas con minúsculas esferas conductoras, lo que permitió la comprensión de la dispersión y absorción de la luz por partículas pequeñas (Chabanne et al., 2008).

Hoy en día, el silicio cristalino es el material semiconductor mayormente utilizado en la tecnología microelectrónica y la fotovoltaica; sin embargo, se ha considerado inadecuado para aplicaciones en optoelectrónica (integración funcional de la óptica y la electrónica), debido a que es un semiconductor de banda prohibida indirecta, por lo que su eficiencia como emisor de luz está altamente limitada (Dal Negro et al., 2000).

Desde el descubrimiento del silicio poroso, las nanoestructuras de silicio han emergido como un material de gran interés para el campo de la optoelectrónica, puesto que a escalas nanométricas, estas estructuras presentan nuevas propiedades y funcionalidades generadas por efectos cuánticos de tamaño. El confinamiento de los estados electrónicos en una, dos o tres dimensiones provoca la formación de pozos, alambres y puntos cuánticos, respectivamente, que modifica dramáticamente la estructura de las bandas. Particularmente en los nanocristales de silicio se genera un incremento en la energía de la brecha de la banda prohibida, que puede ser hasta tres veces mayor que la del silicio en bulto, mejorando significativamente la respuesta óptica; por lo que las nanopartículas de silicio emprenden un camino en nuevas e interesantes aplicaciones en la industria

microelectrónica, fotovoltaica, fotónica, nanobiotecnología y optoelectrónica. La alta compatibilidad de las nanopartículas de silicio con las tecnologías existentes permite que su uso sea más fácil y atractivo en comparación con otro tipo de nanopartículas, por lo cual existe un gran interés por el conocimiento de las propiedades físicas y químicas de los nanocristales de silicio (Canham, 1992; Pavesi et al., 2010).

Existen diferentes métodos para lograr la formación de nanopartículas dentro de una matriz, tales como la evaporación de gas, las técnicas de sol-gel, el electrodeposito, métodos de plasma y la implantación iónica, entre otros. La implantación iónica consiste en irradiar un material con átomos ionizados, usando la suficiente energía para penetrar al interior del éste y generar defectos, los cuales modifican las propiedades ópticas, mecánicas, químicas o eléctricas del sustrato que se irradia. A diferencia de otras técnicas en la formación de nanopartículas, la implantación de iones es muy versátil, ya que se tiene un alto control en la distribución y la concentración de los iones implantados, permitiendo el crecimiento de partículas en una región bien definida de la matriz en la que se realiza la implantación. Ésta técnica permite la formación de defectos del material usando cualquier elemento, independientemente de la solubilidad de éste en el sustrato; además de que los iones implantados quedan resguardados dentro de la matriz, lo que le confiere al material una gran estabilidad y durabilidad (Peña et al., 2007; Sze, 1983; Ziegler et al., 1985).

Debido a sus ventajas, la implantación de iones ha sido utilizada para la formación de nanopartículas metálicas dentro una matriz semiconductor, generalmente dióxido de silicio. En particular las nanopartículas de oro, plata y cobre, en sus espectros UV-visible, presentan bandas de absorción en la región del visible, mientras que los metales análogos en bulto no las presentan. Estas bandas se conocen como resonancia del plasmón de superficie (SPR) y son el resultado de la interacción de los electrones de la banda de conducción de las nanopartículas con un campo electromagnético externo; siendo la plata el metal con mayor efectividad de respuesta a la resonancia de plasmón de superficie (Kumar, 2009).

La fotoluminiscencia es la radiación electromagnética emitida por un sistema como resultado de una excitación mediante radiación o luz. Es una de las técnicas de caracterización no destructivas más utilizadas para conocer los estados electrónicos y las transiciones ópticas en los semiconductores (Ariza, 2003). Se ha observado que la respuesta óptica, en particular la fotoluminiscencia, de un material semiconductor nanoestructurado, se ve modificada debido a la disminución de la brecha de la banda prohibida, así como a la forma, tamaño, estructura y la resonancia del plasmón de superficie de las nanopartículas del material (Canham, 1992; Kumar, 2009).

El objetivo de este trabajo es obtener un material formado por nanopartículas de silicio y plata, usando la técnica de implantación iónica; así como estudiar la influencia de las nanopartículas de silicio y plata en la respuesta óptica del material.

Con ello se espera obtener un material semiconductor a base de silicio que presente una mejor respuesta óptica y eléctrica, pues al disminuir el tamaño de partícula de un semiconductor como el silicio a escalas nanométricas ($1 \times 10^{-9}\text{m}$), el movimiento de los portadores de carga (electrones y huecos) se restringe, generando un cambio en la densidad de estados y con ello un cambio en la estructura de la banda de conducción y la de valencia, lo cual producirá un aumento en la energía de transición de banda prohibida y un aumento en la fotoluminiscencia.

Al introducir impurezas metálicas, en este caso las nanopartículas de plata, se espera un mayor incremento en la energía de transición de banda prohibida en el silicio nanoestructurado, debido al fenómeno de resonancia de plasmón de superficie.

Así se obtendrá un material de bajo costo que servirá para posibles aplicaciones en la optoelectrónica.

Se obtuvieron tres diferentes materiales nanoestructurados mediante la implantación iónica. Primero se realizó la implantación de iones de silicio con una energía de 5 MeV y posteriormente la implantación de iones de plata con energías de a) 1 MeV, b) 3 MeV y c) 1 MeV + 3 MeV. Todas las implantaciones se llevaron a cabo en una matriz de dióxido de silicio de alta pureza (sílice), a temperatura ambiente, utilizando el acelerador Pelletron del Instituto de Física, UNAM. Posterior a cada implantación se llevó a cabo un tratamiento térmico a las muestras con el fin de garantizar la formación de las nanopartículas y disminuir los defectos en la red generados durante la implantación (Plummer et al., 2000).

Para conocer la composición del material, así como la distribución de los átomos implantados en función de su profundidad en la matriz de dióxido de silicio, se realizó un estudio RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) en el acelerador Pelletron del Instituto de Física, UNAM. Durante el análisis RBS se irradió el material con partículas α (He^{2+}) a una energía de 3 MeV. Las partículas α retrodispersadas de la muestra se detectaron a un ángulo de detección de 167° con respecto al haz incidente.

El estudio de la fotoluminiscencia de los materiales nanoestructurados se realizó mediante un sistema de láser de pulsos de Kr-F a diferentes longitudes de onda (380, 515, 660, 795 y 930 nm) ubicado en el laboratorio de fotofísica en el Centro de Ciencia Aplicadas y Desarrollo Tecnológico (CCADET), UNAM.

La presente tesis se divide en cuatro capítulos. El primero exhibe la importancia del silicio nanoestructurado y de las nanopartículas metálicas como una solución al problema del uso de un semiconductor como el silicio en la rama de la optoelectrónica. En el segundo capítulo se describen las propiedades del silicio nanoestructurado, así como los principios de la implantación iónica y la retrodispersión de Rutherford. El tercer capítulo está dedicado a la descripción de las técnicas experimentales empleadas para realizar este trabajo. En el cuarto capítulo se presentan tanto los resultados obtenidos como el análisis de estos. Al final se incluye un anexo en el cual se explica el manejo de los programas de simulación SRIM y SIMRA, así como el tratamiento de los datos experimentales.

Referencias

ARIZA H., "Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica.", Rev. Acad. Colomb.Cienc., **27** (104), 2003, p 357-368.

CANHAM, L., "Nanostructures of porous silicon produce multicolour luminescence by a mechanism that still defies explanation. Silicon optoelectronics at the end of the rainbow?" Physics World, 1992, p 41-44.

CHABANNE, D., BOUQUILLON, A., AUCOUTURIER, M., DECTOT, X. Y PADELETTI, G., "Physicochemical analyses of Hispano-Moresque lustred ceramic: a precursor for Italian majolica?", Applied Physics A: Materials Science y Processing, 2008, **92**, (1), p11-18.

DAL NEGRO, L., PAVESI, L., MAZZOLENI, C., FRANZO, G, Y PRIOLO, F., "Optical gain in silicon nanocrystals", Nature, 2000,**408**, p 440-445.

KUMAR, C., "Metallic Nanomaterials.", Vol.1, Wiley- VCH, Weinheim, 2009, p.99-109.

PAVESI, L. Y TURAN, R., "Silicon Nanocrystals : Fundamentals, Synthesis and Applications.", Weinheim, Wiley-VCH, 2010, p 43-68.

PEÑA, O., CHEANG-WONG, J.C., RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, L., ARNEAS-ALATORRE, J., CRESPO-SOSA, A., RODRÍGUEZ-IGLESIAS, V. Y OLIVER, A., "Metal and metal oxide nanoparticles produced by ion implantation in silica: A microstructural study using HRTEM", Nucl.Instr.and Meth. in Phys. Res., 2007,**B 257** , p 99-103.

PLUMMER, J., DEAL, M. Y GRIFFIN, P. "Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling.", New Jersey, Prentice Hall, 2000, p XI-XIV.

SZE,S.M., "VLSI Tecnología.", McGraw-Hill, New Jersey, 1983.

ZIEGLER, F.,BIERSACK, J.P.YLITTMARK, U., "The Stopping and Range of Ions in Solids.", Pergamon, New York, 1985.

2. Planteamiento del problema

Como el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre y por sus propiedades fisicoquímicas y fácil procesamiento para fabricar circuitos integrados; el silicio es el material más utilizado en la elaboración de dispositivos electrónicos. El material en volumen o en bulto, se considera inadecuado para aplicaciones optoelectrónicas, ya que el silicio es un semiconductor de banda prohibida indirecta, lo que limita su eficacia como emisor de luz visible a diferencia de otros semiconductores como el arsenuro de galio (GaAs) (Canham, 1992; Dal Negro et al., 2000; Rivera et al., 2002).

La optoelectrónica se sitúa entre la electrónica, basada en el silicio que transmite información en forma de electrones o señal eléctrica, y la fotónica, que lo hace en forma de luz, a través de la cual es posible transmitir gran cantidad de información. Su desarrollo comenzó con la creación de nuevos semiconductores de alta velocidad que sirven de base para diodos electroluminiscentes; sin embargo, para lograr una aplicación tecnológica de la optoelectrónica y los circuitos integrados, aún falta mucho por desarrollar. Se busca que el silicio sea capaz de emitir luz para así tener un material optoelectrónico de bajo costo, pues los dispositivos fabricados con semiconductores como el arsenuro de galio, que presenta respuesta óptica, son altamente costosos. En esta búsqueda se ha encontrado que la combinación del silicio con materiales dopantes emisores de luz funciona, pero no adecuadamente para aplicarse tecnológicamente. También se ha encontrado que la reducción del tamaño de las partículas de silicio a escala nanométrica genera emisión de luz a temperatura ambiente debido a los efectos cuánticos de tamaño (Dal Negro et al., 2000; Himeno et al., 1998; Kawachi, 1990; Wong, 2002; Rubio 2002).

2.1 Limitaciones del silicio para aplicaciones en optoelectrónica

Cuando se lleva a cabo el proceso de absorción de radiación electromagnética en un semiconductor, un electrón de la banda de valencia que se encuentra en estado base es excitado y llevado a la banda de conducción, que presenta un estado de mayor energía; este exceso de energía debe ser disipado para que el electrón vuelva al estado base o de menor energía. La energía en el sistema puede disiparse mediante un proceso radiativo o un proceso no radiativo. En un proceso radiativo, la desexcitación se lleva a cabo mediante la emisión de un fotón; mientras que en un proceso no radiativo la energía se disipa en forma de calor. Para el caso del silicio en bulto la probabilidad de que ocurra una recombinación radiativa es muy baja, pues es un semiconductor de banda prohibida indirecta, lo cual hace que los procesos de desexcitación ocurran en mayor medida mediante una recombinación no radiativa (Canham, 1992).

La luminiscencia ocurre en el infrarrojo cercano con una eficiencia de 0.0001%, lo que significa que sólo se produce un fotón por cada millón de carga inducida para la recombinación. Se han investigado muchas estrategias para amplificar la emisión de luz en el silicio, una de éstas es la reducción del tamaño de partícula hasta escalas nanométricas, en donde se ha observado un aumento en la fotoluminiscencia. Desde que Canham en 1990 estudió la fotoluminiscencia en el silicio poroso, las nanoestructuras de silicio han cobrado importancia, sobre todo por la capacidad de ser utilizadas como material optoelectrónico. La manipulación de la forma y la dimensión de las nanoestructuras permite la generación de propiedades únicas; así estudiando fenómenos como la emisión de fotoluminiscencia, el efecto de elementos dopantes y los efectos cuánticos de tamaño, se puede controlar la respuesta óptica de un sistema.

En un semiconductor como el silicio, al disminuir el tamaño de partícula, se restringe el movimiento en una, dos o tres dimensiones en los portadores de carga (electrones y huecos) generando pozos, alambres o puntos cuánticos

respectivamente; se genera un cambio en la densidad de estados, cambia la estructura de la banda de conducción y la de valencia, por lo que aumenta hasta tres veces la energía de transición de banda prohibida, como se muestra en la figura 2.1.1, y la fotoluminiscencia en un 23% (Canham, 1992; Pavesi y Turan, 2010).

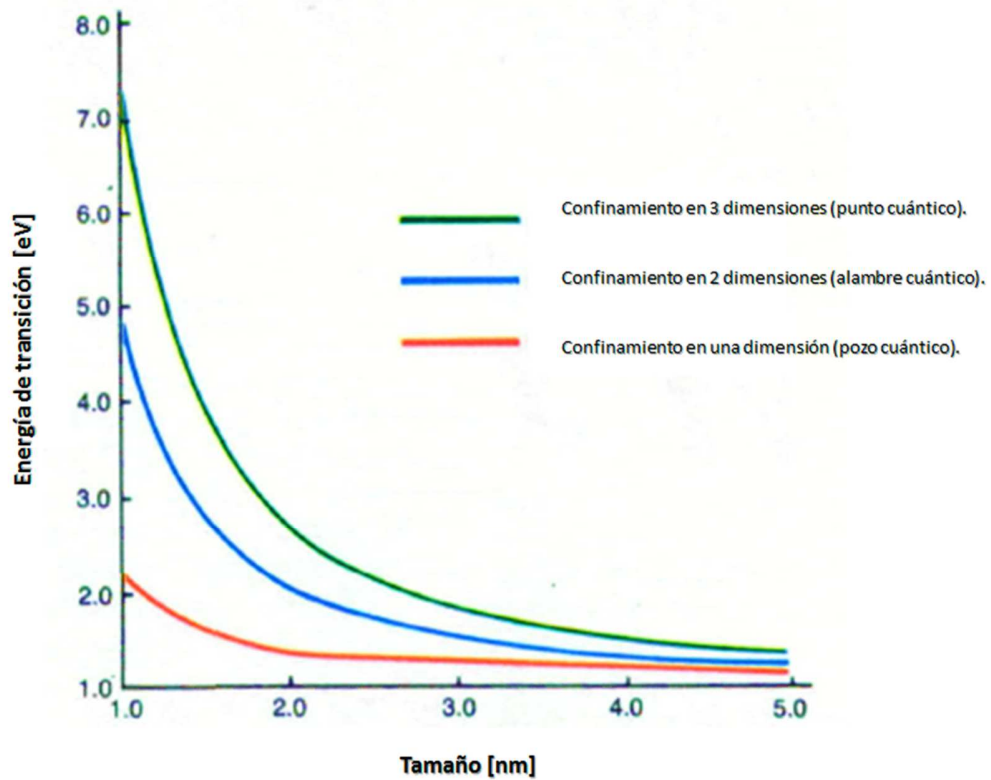


Figura 2.1.1. Energía de transición de la banda prohibida en función del tamaño para nanopartículas de silicio confinadas en una, dos y tres dimensiones.

2.2 Nanopartículas de silicio y nanopartículas metálicas

A pesar de que la reducción de tamaño de partícula provoca un aumento en la energía de la banda prohibida y la fotoluminiscencia, el silicio preserva su estructura de banda prohibida indirecta. Su conductividad eléctrica no cambia; por lo tanto, su comportamiento no es apto para aplicaciones optoelectrónicas. Se ha observado que la adición de impurezas a un semiconductor altera la estructura electrónica, cambiando sus propiedades eléctricas y ópticas. Para escalas nanométricas sucede más drásticamente, por lo que el control de la cantidad de impurezas debe hacerse con mayor precisión. En la síntesis de las nanopartículas de silicio se introducen impurezas de acuerdo a la técnica utilizada; sin embargo también se pueden adicionar posteriormente al tratamiento de preparación de partículas (Pavesi y Turan, 2010).

La implantación de iones es una técnica utilizada para la formación de nanopartículas de silicio y para introducir otras impurezas en un sustrato. Esta técnica combina la aceleración de iones con el control de la introducción de un número preciso de átomos en el sustrato. En un acelerador del tipo Van de Graff o Pelletron, los iones se aceleran y son irradiados en el material. Los iones que impactan en el sustrato se frenan debido a interacciones nucleares o electrónicas con los átomos de la red cristalina del mismo, generando un gran número de desplazamientos en la red cristalina. Se producen daños en la estructura y eventualmente se genera una especie de capa amorfa donde los átomos dopantes o impurezas se difunden. La energía con la que se impactan los iones en el sustrato debe de ser mayor a 15 eV para que pueda haber un desplazamiento de los átomos de silicio en la red cristalina. Dependiendo de la energía de irradiación será la profundidad a la cual se implanten las impurezas en el sustrato (Plummer et al., 2000).

Cuando se introducen nanopartículas metálicas en un sustrato y el material se irradia con una onda electromagnética, se produce un fenómeno conocido como resonancia de plasmón de superficie, que es una oscilación colectiva de los

electrones libres, provocando un aumento del campo eléctrico en el medio envolvente. Si en un sustrato se tienen nanopartículas de silicio y se adicionan nanopartículas metálicas, no sólo aumentará la respuesta óptica del sistema, sino también la eléctrica, generando así un material con características importantes para su aplicación tecnológica en optoelectrónica.

En particular las nanopartículas de plata han demostrado ser buenas candidatas para su uso en el área de la optoelectrónica. La resonancia del plasmón de superficie inducida por nanopartículas de plata aumenta el coeficiente de absorción del sustrato en el que se encuentra, este efecto se debe a que el campo electromagnético local aumenta cerca de la superficie del metal cuando la longitud de onda de la fuente de radiación coincide con la absorción óptica del plasmón, generando la presencia de bandas de absorción en la región visible del espectro electromagnético (Kumar, 2009; Moulin et al., 2008; Peña et al., 2007).

2.3 Fotoluminiscencia

La fotoluminiscencia es un fenómeno de emisión de radiación UV, visible o IR, mediante un proceso radiativo, ante la absorción o excitación previa de un sistema. Presenta dos variantes: la fluorescencia; emisión instantánea de luz con un tiempo de retraso menor a 100 (ns) y la fosforescencia, que es emisión de luz con un retraso mayor a 100 (ns). La emisión de luz es un estado de no equilibrio, en el cual los electrones se encuentran en la banda de conducción y los huecos en la banda de valencia, por lo que la generación de fotones está determinada por la densidad de estados ocupados de mayor energía en la banda de conducción y de los estados no ocupados de menor energía en la banda de valencia; también por la probabilidad de que un electrón realice la transición del estado de mayor energía a uno de menor energía, es decir, de que se lleve a cabo un proceso de recombinación (Araiza, 2003; Cortés et al., 2010).

El proceso de fotoluminiscencia en semiconductores puede dividirse en tres etapas:

Etapa 1: El átomo pasa de su estado base, en el cual la banda de conducción está vacía y la de valencia llena, a un estado excitado; creando así pares electrón-hueco, transfiriendo electrones de la banda de conducción a la banda de valencia.

Etapa 2: Los pares electrón-hueco transfieren su energía a la red cristalina en forma de vibraciones y pasan de un estado excitado a un estado relajado.

Etapa 3: Los pares electrón hueco se recombinan emitiendo un fotón.

A partir de que los semiconductores nanoestructurados han tenido gran importancia en aplicaciones optoelectrónicas, la fotoluminiscencia se ha convertido en el método espectroscópico más utilizado para su caracterización, ya que permite conocer los estados electrónicos y las transiciones ópticas en los semiconductores (Moehl et al., 2003).

Referencias

- ARIZA H., "Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica.", Rev. Acad. Colomb.Cienc., 2003, **27**(104), p 357-368.
- CANHAM, L., "Nanostructures of porous silicon produce multicolor luminescence by mechanism that still defies explanation: Silicon optoelectronics at the end of the rainbow?", Physics World, 1992, p 41-44.
- CORTÉS, F., ABARGUES, R., MARTÍNEZ-PASTOR, J., PERALES, E., CHORRO, E., MARCHANTE, E., VIQUEIRA, V. Y MARTÍNEZ-VERDÚ, F., "Evaluación espectral y colorimétrica de puntos cuánticos como nuevos emisores de luz.", IX Congreso Nacional del Color Alicante, Universidad de Alicante, 2010.
- DAL NEGRO, L., PAVESI, L., MAZZOLENI, C., FRANZO, G, Y PRIOLO, F., "Optical gain in silicon nanocrystals", Nature, **408**, 2000, p 440-445.
- HIMENO, A., KATO, K. Y MIYA, T., "Silica-based planar lightwave circuits," IEEE J Selected Topics Quantum Electron., 1998, **4**, p 913-924.
- KAWACHI, M., "Silica waveguides on silicon and their application to integrated components," Opt. Quantum Electron., 1990, **22**, p 391-416.
- KUMAR, C., "Metallic Nanomaterials." Vol. 1, Wiley- VCH, Weinheim, 2009, p 99-109.
- MOEHL, S., ZHAO, H., DAL DON, B., WACHTER, S., Y KALT, H., Journal of Applied Physics, 2003, **93** (10), p 6265-6275.
- MOULIN, E., SUKMANOWSKI, J., SCHULTE, M., GORDIJIN, A., ROYER, F. Y STIEBIG, H., "Thin-film silicon solar cells with integrated silver nanoparticle.", Thin Solid Films., 2008, **516**, p 6813-6817.
- PAVESI, L. Y TURAN, R., "Silicon Nanocrystals: Fundamentals, Synthesis and Applications", Weinheim, Wiley-VCH, 2010, p 43-68.
- PEÑA, O., RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, L., ROIZ, J., CHEANG-WONG, J.C., ARENAS-ALATORRE, J., CRESPO-SOSA, A. Y OLIVER, A., "Average size of Ag

nanoclusters in silica determined by optical light absorption measurements.”, *Revista Mexicana de Física*, 2007, **553**(5), p 62-66.

PLUMMER, J., DEAL, M. Y GRIFFIN, P. “Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling.”, New Jersey, Prentice Hall, 2000, p XI-XIV.

RIVERA, W., TORRES, C.M.Y. PISSO, A. E., “Estudio de silicio poroso por FTIR, “*Revista Colombiana de Física.*”, 2002, **3**, p 82-85.

RUBIO,M., “La era del fotón.”, *Técnica Industrial*, 244, Marzo, 2002, 21-27p.

WONG, H., “Recent developments in silicon optoelectronic devices,” *IEEE International Conference on Microelectronics.*, 2002, **11**, p 12-15.

3. Desarrollo teórico

3.1 Silicio nanoestructurado

Los circuitos integrados de silicio son uno de los desarrollos tecnológicos más impresionantes de nuestra era. Su tecnología se ha desarrollado en gran medida a través de métodos empíricos. La industria de los chips ha ido creciendo tan rápido que prácticamente no ha habido tiempo para estudiar detalladamente los principios físicos que están detrás de su construcción; sin embargo, el futuro de la tecnología de los circuitos integrados está en las estructuras a pequeña escala, lo que requiere un entendimiento a niveles atómicos y moleculares del comportamiento del silicio para construir estructuras a escala nanométrica (Plumener et al., 2000).

En los últimos años se han desarrollado y modificado una gran variedad de nanomateriales con el objetivo de mejorar sus propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas; incrementando de esta manera su funcionalidad y versatilidad. El advenimiento de la nanociencia y la nanotecnología se debe a un gran esfuerzo para desarrollar nuevas estrategias para sintetizar nanomateriales teniendo un control en su forma y su tamaño. Las nanopartículas tienen un tamaño en el rango de 1 a 10 nanómetros (nm). A pesar de que recientemente el campo de la nanotecnología se ha ampliado, ésta ha sido desarrollada desde la antigüedad; de hecho, se tienen vestigios del uso de la nanotecnología en Grecia durante el periodo clásico, que se remonta a los años 620-300 A.C. Se han encontrado jarrones decorados con un color negro/rojo que presentan nanopartículas con estructura tipo espinela, formadas dentro de una capa vítrea (Boardman, 1991; Maniatis et al., 1992). Los clusters y cristales nanométricos exhiben propiedades significativamente diferentes en comparación con los cristales de mayor tamaño. Frecuentemente las nanopartículas presentan propiedades físicas y químicas muy particulares, tales como las electrónicas u ópticas, que están directamente relacionadas con su tamaño, pues cuando disminuye la dimensión de las estructuras, los efectos

cuánticos se hacen presentes. Debido a su tamaño, una nanopartícula puede ser considerada como un átomo; entonces posee estados electrónicos discretos en donde un electrón se describe como una función de onda. La estructura electrónica es alterada, pasando de bandas electrónicas continuas a discretas o niveles electrónicos cuantizados, por lo que las nanopartículas presentan propiedades diferentes a las partículas del mismo material en bulto (Altavilla y Ciliberto, 2011).

3.1.2 Silicio en bulto

El silicio es uno de los elementos más abundantes en la corteza terrestre, constituyendo el 27.72% de ésta. Se presenta en dos formas distintas: amorfa y cristalina. En su forma amorfa tiene un color marrón; sin embargo en su forma cristalina presenta octaedros de color azul grisáceo, lo que le da su tono característico al silicio usado en aplicaciones electrónicas. En la tabla periódica se localiza en el grupo 14; tiene 14 electrones y 14 protones. En la tabla 3.1.1 se muestran algunas de las propiedades físicas y químicas que presenta el silicio.

Tabla 3.1.1. Propiedades físicas y químicas del silicio (<http://themerckindex.chemfinder.com>; <http://ruff.info>).

Masa atómica [g mol ⁻¹]	28.0855 ± 0.0003
Radio atómico [pm]	117.6
Electronegatividad	1.9
Configuración electrónica	[Ne] 3s ² 3p ²
Volumen molar [cm ³ mol ⁻¹]	12.06
Punto de fusión [K]	1687.15
Primera energía de ionización [KJmol ⁻¹]	786.52
Segunda energía de ionización [KJmol ⁻¹]	1577.15
Tercera energía de ionización [KJmol ⁻¹]	3231.61

El silicio presenta una estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC), con un parámetro de red de 5.4299 Å y un volumen de celda de 160.09 Å³, figura 3.1.2.1 (<http://rruff.info>).

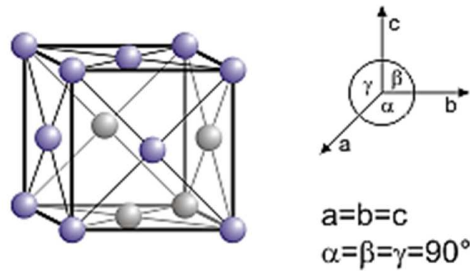


Figura 3.1.2.1. Arreglo espacial de un cristal de silicio.

El número de átomos de silicio en una celda unitaria es de 4; $\frac{1}{2}$ por 6 átomos en el centro de las caras del cubo y $\frac{1}{8}$ por 8 átomos en los vértices. El número de coordinación es de 12 como se muestra en la figura 3.1.2.2, en la que el átomo del centro de una de las caras está en contacto con los 12 átomos más cercanos.

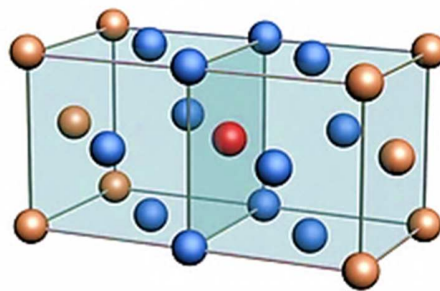


Figura 3.1.2.2. Número de coordinación para un átomo de silicio.

Para esta estructura cristalina se tiene un factor de empaquetamiento del 74%. La celda unitaria cúbica centrada en las caras tiene huecos o intersticios con geometría octaédrica y tetraédrica. Los huecos octaédricos se localizan en el centro

y a la mitad de cada arista (figura 3.1.2.3). En total hay cuatro huecos octaédricos por cada celda unitaria; uno al centro del cubo y $\frac{1}{4}$ por 12 a la mitad de las aristas.

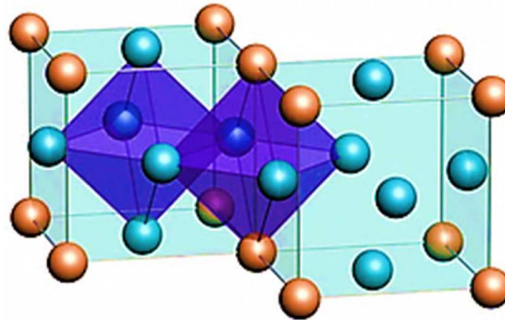


Figura 3.1.2.3. Ubicación de los huecos octaédricos en la celda unitaria del silicio.

Los huecos tetraédricos se sitúan en el interior de la celda unitaria en posición $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, siendo ocho en total por celda unitaria (figura 3.1.2.4).

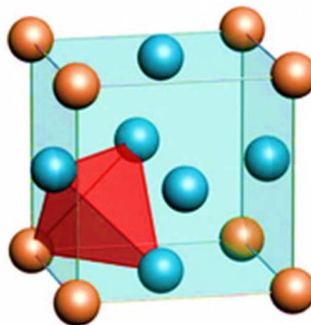


Figura 3.1.2.4. Ubicación de los huecos tetraédricos en la celda unitaria del silicio.

La estructura cristalina determina las propiedades físicas y químicas del silicio, el cual es un sólido covalente, sus átomos se encuentran enlazados por electrones de valencia compartidos. Su enlace es direccional y determina el arreglo geométrico en la estructura cristalina. Presenta conductividad eléctrica baja a temperatura ambiente y se comporta como un aislante a bajas temperaturas, por lo cual es considerado como un semiconductor; de hecho es uno de los

semiconductores más importantes por sus aplicaciones en la electrónica (West, 1987; Patterson y Bailey, 2010).

3.1.3 Silicio como semiconductor

La conductividad eléctrica de un sólido depende del número de portadores de carga disponibles para conducir la corriente eléctrica. De acuerdo con la teoría de bandas, para un semiconductor, la brecha de separación entre la banda de valencia y la de conducción no es muy grande por lo que los electrones de la banda de valencia pasarán con cierta facilidad a la banda de conducción.

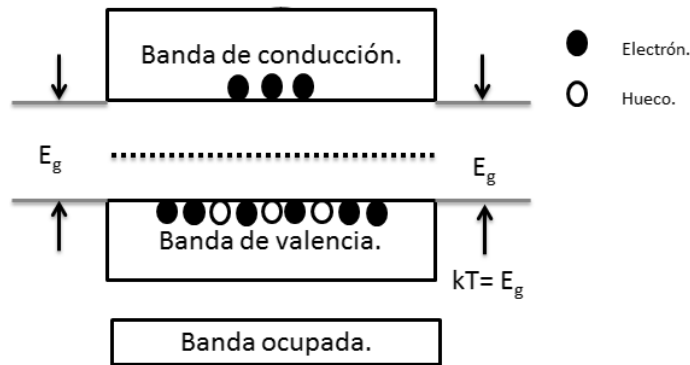


Figura 3.1.3.1. Esquema de bandas para un semiconductor, ocupación de niveles de energía.

Para un semiconductor como el silicio, la separación entre la banda de valencia y la banda de conducción está dada por E_g (figura 3.1.3.1) que es conocida como la energía de la banda prohibida y ésta es de aproximadamente 1.14 eV (Canham, 1992).

Cuando el material es excitado, los electrones de la banda de valencia pasan a la banda de conducción. A temperaturas bajas los electrones no saltan de una banda a otra; pero al aumentar la temperatura los saltos se llevan a cabo. Si se excita un electrón de la banda de valencia y pasa a la banda de conducción, queda

prácticamente libre de moverse dentro del cristal, dejando un hueco en un estado no ocupado de la banda de valencia, hacia el cual otros electrones de átomos vecinos pueden dirigirse; formándose así pares electrón-hueco dentro del material. Los huecos en la banda de valencia y los electrones en la banda de conducción son portadores de carga; cuando hay interacción entre ellos se lleva a cabo una recombinación. En los semiconductores, los pares electrón-hueco son limitados, así que no se logra una conducción tan eficiente como en los metales, que son conductores. Este fenómeno es conocido como semiconducción intrínseca. Los semiconductores intrínsecos se caracterizan por comportarse como conductores poco eficientes a altas temperaturas y aislantes a bajas temperaturas.

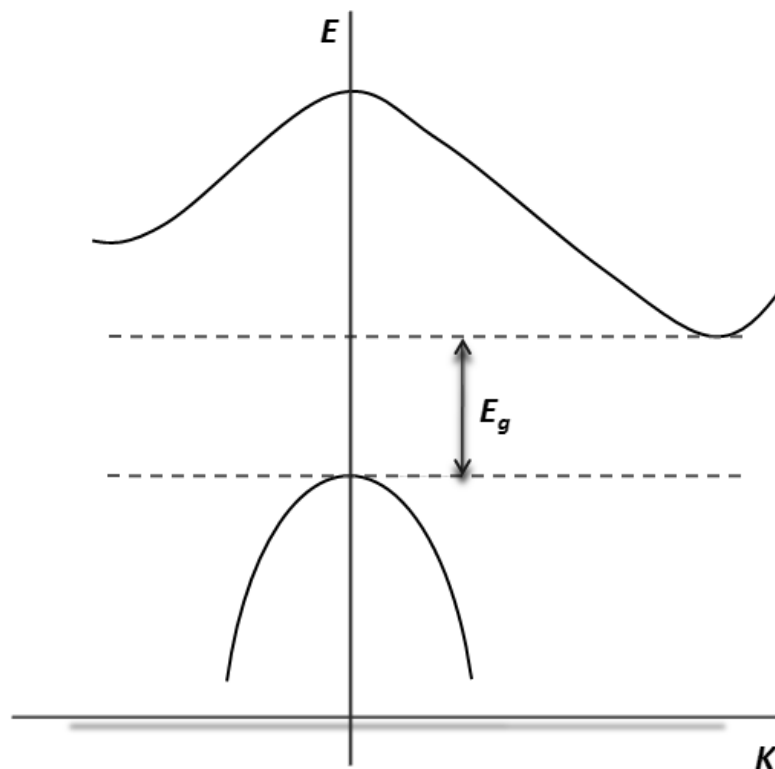


Figura 3.1.3.2. Relación de la energía (E) en función del vector de onda (K) para el silicio.

En la figura 3.1.3.2 se muestra el máximo para la energía de la banda de valencia y el mínimo para la banda de conducción en función del vector de onda que se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger con el potencial periódico $V(x,y,z)$ para el silicio. Se observa que el máximo y el mínimo no corresponden para un mismo valor de K ; por lo tanto, se considera al silicio como un semiconductor de banda prohibida indirecta, lo cual implica que la probabilidad de que se lleve a cabo un proceso de recombinación entre un electrón de la banda de conducción y un hueco de la banda de valencia es baja; por lo tanto, un monocristal de silicio exhibe baja conductividad intrínseca (Huheey et al., 1997; Navarro, 2006; Patterson y Bailey, 2010).

Por medio de la adición controlada de impurezas a un cristal semiconductor es posible generar una mayor cantidad de pares electrón–hueco y aumentar la conductividad. De acuerdo a la naturaleza de las impurezas es posible generar dos tipos de semiconductores. Si se adiciona una impureza electropositiva o carente de electrones con respecto a la estructura atómica del cristal, ésta conserva los huecos, mientras que los electrones se quedarán en los átomos del cristal creando una separación energética. Como la impureza proporciona huecos y genera un déficit de carga negativa se le denomina semiconductor tipo P; también llamado donador de huecos o aceptor de electrones. Por el contrario, si se adiciona una impureza con exceso de electrones con respecto a los átomos del cristal, se forma un semiconductor donador de electrones y se le conoce como semiconductor tipo N. La incorporación de impurezas en un cristal semiconductor genera un aumento en la conductividad, a este fenómeno se le denomina semiconducción extrínseca. (Huheey et al., 1997; Navarro, 2006; Patterson y Bailey, 2010).

3.1.3 Nanocristales de silicio

El silicio en bulto no emite luz por medio de excitación óptica o eléctrica. Como se mencionó anteriormente, el valor de la energía de la banda prohibida E_g es de aproximadamente 1.14 eV, pero al ser un semiconductor de banda indirecta, no es

posible obtener una recombinación eficiente. La luminiscencia que puede ocurrir se da en el infrarrojo cercano y sólo se libera un fotón por un millón de carga inducida, siendo muy ineficiente como conductor de luz. Por esta razón el silicio en bulto no es utilizado para aplicaciones ópticas (Canham, 1992). Sin embargo, en 1990, se observó que si se reducían las dimensiones del silicio hasta escala nanométrica, aproximadamente de 1 a 5 (nm), sus propiedades ópticas cambiaban considerablemente, haciéndolo útil para aplicaciones optoelectrónicas. Lo anterior se debe a que la estructura de las bandas de los cristales se modifica cuando el tamaño se aproxima al orden del radio de Bohr (aproximadamente 4.9 (nm)), pues a esta escala los efectos cuánticos se presentan. De esta manera los nanocristales de silicio presentan propiedades diferentes a las del silicio en bulto, como la fotoluminiscencia. Estas propiedades pueden manipularse controlando el tamaño y la forma de los nanocristales; así como con la adición de impurezas (Pavesi y Turan, 2010).

Cuando un semiconductor tiene dimensiones del orden del radio de Bohr o menor, la movilidad de los portadores de carga se restringe a una, dos o tres dimensiones, a esto se le llama confinamiento cuántico; provocando un cambio en el número de estados por unidad de volumen disponibles para ser ocupados por electrones en la banda de conducción y por huecos en la banda de valencia. Esto tiene consecuencias relevantes en las propiedades de un semiconductor. Si el movimiento de los portadores de carga se restringe a una dimensión se crea lo que se conoce como pozo cuántico, en el cual la densidad de estados es una función escalón. Si se tiene una restricción a dos dimensiones se genera un alambre cuántico, en el cual los portadores están restringidos a moverse en una sola dimensión; la función de densidad de estados en este caso es más compleja y debe incluir la degeneración de los niveles de energía. El caso en el cual el movimiento de los portadores de carga se restringe a tres dimensiones, se genera lo que se denomina punto cuántico, en el cual la función de densidad de estados es una serie de funciones centradas en las energías que son solución de la ecuación de Schrödinger para el confinamiento en tres dimensiones. La estructura electrónica

para un punto cuántico es muy semejante a la de un átomo; por lo tanto un punto cuántico puede ser considerado como un átomo artificial (figura 3.1.3.3) (Navarro, 2006; Patterson y Bailey 2010).

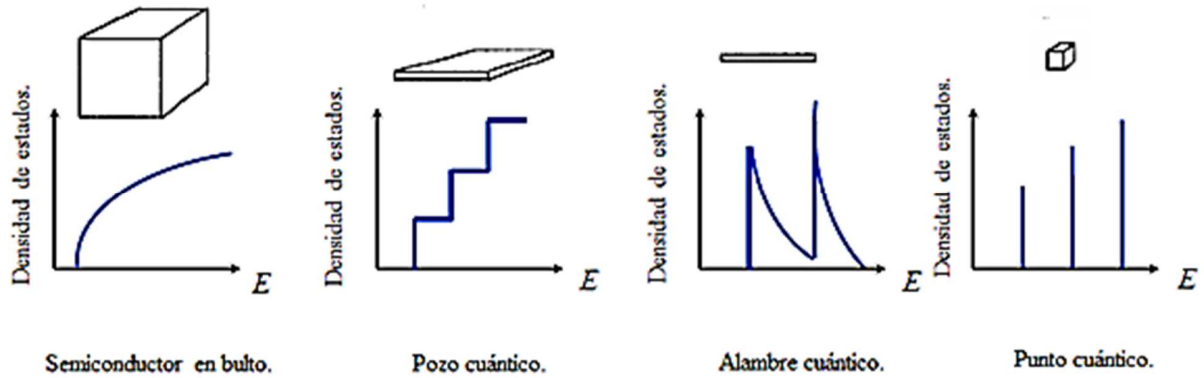


Figura 3.1.3.3. Gráficas de densidad de estados en función de la energía para un semiconductor en bulto y los tres tipos de confinamiento cuántico.

La presencia de pozos, alambres y puntos cuánticos modifica dramáticamente la estructura de las bandas. En particular, para los nanocristales de silicio se incrementa la energía de la brecha de la banda prohibida y puede ser hasta tres veces mayor a la del silicio en bulto. La probabilidad de que haya una recombinación aumenta incrementándose así la eficiencia de la luminiscencia. Para el caso del silicio se logra una mayor probabilidad de recombinación radiativa en donde hay una interacción entre un hueco y un electrón y se emite un fotón de una energía igual a la energía de la banda prohibida, por lo tanto se observa un aumento en la fotoluminiscencia (Canham, 1992).

3.2 Implantación iónica

La implantación iónica consiste en la irradiación de un material con átomos ionizados y con la suficiente energía para penetrar al interior de éste. Durante la implantación iónica se crean defectos o imperfecciones en el material, los cuales modifican las propiedades ópticas, mecánicas, químicas o eléctricas del sustrato que se irradia. (Sze, 1983; Ziegler et al., 1985).

El uso de la implantación iónica para la formación de defectos en materiales semiconductores fue patentado por William Shockley en 1954 en los laboratorios Bell. El método de implantación iónica que se ha utilizado en las últimas décadas para introducir impurezas en los materiales semiconductores fue desarrollado en la década de los 60, cuando se lograron desarrollar uniones n-p en el interior de semiconductores, siendo los transistores bipolares los primeros dispositivos microelectrónicos fabricados de esta manera (Morris, 1999; Hernández-Mangas, 2000; Shockley, 1954).

A diferencia de otras técnicas que son lentas y no se logra una concentración controlada de impurezas en el material, la técnica de implantación de iones para formar defectos en un material es muy versátil, ya que se tiene un alto control en la distribución y la concentración de los iones implantados, permitiendo el crecimiento de partículas en una región bien definida de la matriz en la que se realiza la implantación. Permite la formación de defectos en el sustrato usando cualquier elemento, independientemente de la solubilidad de éste en el material; además de que los iones implantados quedan resguardados dentro de la matriz, lo que le confiere al material una gran estabilidad y durabilidad. (Peña et al., 2007).

Algunas características de la implantación iónica son las siguientes:

- Es un proceso rápido, homogéneo y reproducible.
- El número de átomos implantados y su energía se controla con mucha precisión.

- Permite controlar el perfil de concentración y de profundidad de los iones implantados.
- Permite fabricar dispositivos de dimensiones muy pequeñas.
- Se lleva a cabo a temperatura relativamente baja; así los defectos existentes en el material no se modificarán en exceso debido a la difusión térmica.

Al implantar iones a una energía alta, se producen dos efectos: aparecen defectos en la red cristalina del material y los iones implantados quedan como impurezas ocupando posiciones intersticiales en la red cristalina. Un tratamiento térmico de recocido al material permite disminuir los defectos en la red y difundir los iones para formar nuevas estructuras, tales como las nanopartículas. (Pelaez et al., 1998; Ziegler et al., 1985).

Para que se lleve a cabo una implantación iónica, los iones son acelerados con cierta energía, que va desde algunos KeV hasta varios MeV. Esta variación en la energía permite implantar iones desde unas capas atómicas debajo de la superficie hasta varias micras al interior del material. Cuando un material es irradiado con iones, éstos penetran a través de la superficie y comienzan a interactuar con los átomos de la matriz, perdiendo energía hasta frenarse dentro del material y quedar implantados en éste. Esta pérdida de energía o frenado se debe a la interacción de los iones con los núcleos y los electrones de los átomos que forman el material. Los choques con los electrones producen ionizaciones y excitaciones de los átomos, y suceden con mayor frecuencia ya que se encuentran distribuidos en todo el volumen del átomo. Este fenómeno es conocido como frenado electrónico y se lleva a cabo principalmente cuando el ion penetra el material y tiene una energía alta. Una vez que el ion ha perdido parte de su energía producto de las ionizaciones y excitaciones, es más probable que éste choque con los núcleos de los átomos, produciendo desplazamiento de los átomos del material y en consecuencia daños estructurales o defectos en la red. La interacción con los núcleos o átomos completos es conocida como frenado nuclear.

La trayectoria del ion desde el punto de incidencia hasta que se detiene dentro del material sufre desviaciones, no hay dos trayectorias iguales para dos iones distintos. Al perder su energía, un ion dentro del material va ocasionando daños y modificando las propiedades de este. La distancia total que recorre un ion desde el punto de incidencia en el material hasta que se detiene en su interior se le conoce como alcance. El recorrido de un ion dentro de un material es un proceso estocástico, por lo que la profundidad que alcancen será diferente para cada uno de ellos y dependerá tanto de la energía y del tipo del ion incidente como del ángulo de implantación y la composición del material en el cual es implantado.

Cuando los iones comienzan a incidir en una matriz, éstos se alojan en promedio a una profundidad que depende de su energía y de la composición de la muestra. Inicialmente los iones implantados quedan disueltos en el interior de la matriz hasta llegar a un punto de sobresaturación a partir del cual comienzan a nuclearse en pequeñas partículas. En la medida que aumenta la afluencia de iones estas partículas van creciendo de tamaño y puedan llegar a coalescer y formar una capa homogénea en el interior de la matriz.

Experimentalmente los iones irradiados o proyectiles tienen la misma energía y ángulo de implantación, pero por el carácter aleatorio del proceso de frenado presentan una distribución de alcances. Para proyectiles ligeros de alta energía esta distribución es del tipo gaussiana; sin embargo esta distribución depende del tipo de proyectil y de su energía inicial, así como del material que recibirá al ion.

Debido a que la dispersión en la distribución de iones en el interior de una matriz aumenta a medida que los iones presentan mayores energías, los estados de coalescencia se obtienen a menores afluencias al implantar a menores energías. También, debido a que los iones incidentes pueden ir erosionando la superficie de la muestra por efecto de "sputtering" o erosión iónica, es posible observar una disminución en la profundidad a la que quedan implantados al aumentar la afluencia. La erosión iónica es un proceso mediante el cual se erosionan las capas de un material mediante la incidencia de iones pesados, esto

se debe a la transferencia de momento durante las colisiones secuenciales (Rickars 2001; Rodríguez, 2009).

La implantación de iones en un material se lleva a cabo en un implantador iónico, utilizando una fuente capaz de producir iones de un elemento en específico, una vez producidos los iones se requiere un sistema acelerador que les proporcione suficiente energía cinética para que estos puedan llegar al material y quedar implantados dentro de él y una cámara en donde se encuentra el material que será irradiado, también llamado blanco. Una vez producida la partícula, ésta se dirige hacia el sistema acelerador en el cual se aumenta su velocidad. Una vez que la partícula es acelerada, se dirige a través de una línea que se encuentra al vacío y por donde es enfocada y dirigida hacia la cámara de implantación, donde se encuentra el blanco. Los aceleradores utilizados para la implantación de iones son del tipo electrostático tales como el acelerador de Van de Graaff o el Pelletron (Rodríguez, 2009; Miranda, 1996).

En la figura 3.2.1 se muestra el arreglo experimental para la implantación de iones. Se observa que los iones irradiados llegan a la superficie del blanco en dirección del eje Z, ya que el haz de iones es unidireccional con respecto a la colocación de la muestra.

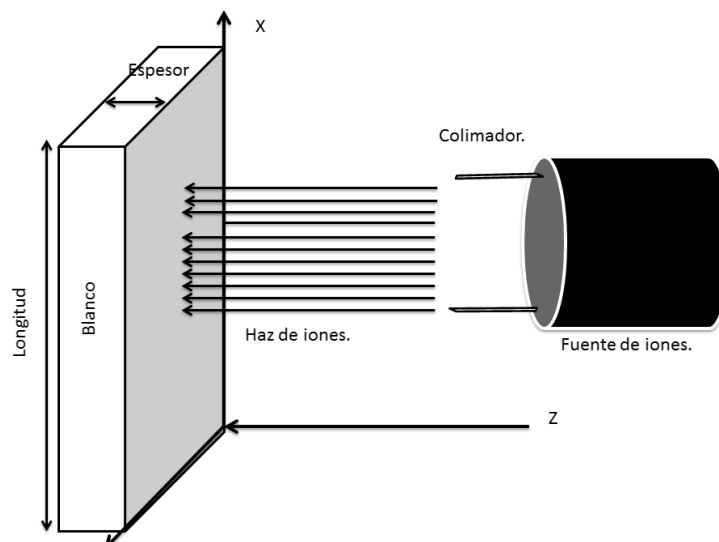


Figura 3.2.1. Arreglo experimental para la implantación de iones.

En los experimentos típicos de implantación se implantan un gran número de iones o proyectiles (considerados monoenergéticos) sobre un blanco que los absorbe. La implantación de iones en el blanco se lleva a cabo por unidad de área del blanco expuesta a los proyectiles. El número total de iones irradiados por unidad de área se le denomina afluencia y se puede expresar mediante la siguiente ecuación:

$$\Phi = \frac{it}{QA} \quad (3.2.1)$$

donde i es la corriente eléctrica durante el experimento [A], la cual se considera constante; t es el tiempo [s] que dura la implantación, Q es la carga [C] del proyectil y A es el área [cm²] del blanco expuesta a la irradiación. Por lo tanto, la afluencia está dada en [proyectiles/ cm²].

3.2.1 Efectos de la radiación en la materia

El tipo de radiación y su energía son parámetros determinantes en los procesos de interacción, así como el tipo de material que absorbe esta radiación, su densidad, número atómico y peso molecular. La distribución espacial no es homogénea; la radiación, ionización, el daño estructural y el depósito de energía se distribuyen en pequeñas o grandes regiones alrededor del tránsito de la radiación. También es posible que se produzcan radiaciones o proyectiles secundarios, por lo que parte de la energía de la radiación incidente se puede depositar por una radiación secundaria lejos del punto de interés.

3.2.2 Procesos principales de interacción de radiación con la materia

La interacción de radiación se lleva a cabo más comúnmente con los electrones del material, debido a su gran abundancia. La ionización y excitación producen frenado electrónico. En menor medida las radiaciones interactúan con los núcleos de los

átomos del material; si esto sucede, existe la posibilidad de que el átomo afectado sea desplazado de su posición original, generando un cambio en la estructura del material.

Es a través de estos procesos que las radiaciones depositan casi la totalidad de su energía en las partículas con las que colisionan. La mayor parte de esta energía es transformada en calor, elevando la temperatura del material; también puede provocar reacciones químicas y cambios en la estructura. Este tipo de transferencia de energía sucede fuera del equilibrio termodinámico ya que la rapidez de estos procesos es muy grande. Para tener una idea de la rapidez de estos procesos, después de la irradiación, en un tiempo del orden de 10^{-17} - 10^{-16} s, se llevan a cabo en el material cambios físicos; mientras que a un tiempo del orden de 10^{-12} s se presenta un proceso de termalización, dentro del cual se encuentran los fenómenos de difusión y reacciones químicas regidas por la difusión.

El tipo de radiación (iones positivos, electrones, fotones, neutrones) y su energía son parámetros determinantes en los procesos de interacción radiación-materia. Si la radiación incidente presenta carga eléctrica, ésta se deposita en el material absorbedor. Si consta de átomos o núcleos atómicos, como los iones positivos, éstos se introducen como impurezas en el material. Las condiciones experimentales en las que se efectúa la irradiación también son importantes, tales como la temperatura, la geometría del proceso, el soporte del blanco, las condiciones de vacío, etc.

3.2.3. Interacción de iones positivos con la materia

Se les llama iones positivos a los átomos que han perdido uno o más electrones, como consecuencia poseen carga neta positiva y viajan a altas velocidades. Cuando un ion penetra en un material con cierta velocidad y avanza dentro de él, va perdiendo energía cinética gradualmente, debido al gran número de partículas que va encontrando en su trayectoria, esto provoca un frenado gradual del proyectil

hasta que quede detenido totalmente. El frenado puede ser de dos tipos: electrónico o nuclear (Rickards, 2001).

A la energía que pierde un ion por unidad de longitud recorrida se le denomina poder de frenado, se puede expresar como $-\frac{dE_1}{dx}$ y tiene unidades de energía por unidad de longitud. Esta definición se establece suponiendo que la trayectoria del proyectil es rectilínea, lo cual sucede en general cuando la velocidad es alta. También se supone que la pérdida de energía es el resultado de un gran número de eventos que se pueden tratar estadísticamente.

El frenado electrónico se debe a la interacción del proyectil con los electrones del material, produce ionización y excitación atómica, su trayectoria es esencialmente recta ya que los electrones no alcanzan a desviar al proyectil sensiblemente debido su masa. Se requiere un gran número de colisiones para producir el frenado. Dependiendo de la energía del proyectil se pueden identificar cuatro regiones, en las que se emplean distintos modelos para explicar el frenado, los límites de éstas varían según el proyectil y el blanco. La región de mayor interés es en la que la velocidad del proyectil es lo suficientemente grande para considerarlo totalmente ionizado y se considera que los electrones del material se encuentran inicialmente en reposo con respecto al ion o proyectil. También se considera que la energía perdida por el proyectil es la energía transferida a los electrones individuales.

El frenado nuclear es debido a colisiones entre el proyectil y átomos completos del material o blanco. El proyectil y los átomos con los que choca tienen masas similares, el proyectil puede ser desviado dando lugar a trayectorias no rectilíneas, pues en cada colisión el ángulo de dispersión puede ser grande debido a la similitud de las masas. Los átomos del blanco pueden ser desplazados de sus posiciones originales dentro de la red cristalina dando lugar a daños estructurales. El frenado nuclear es importante cuando la velocidad del proyectil es pequeña; la fracción de ionización es baja y el proyectil se desplaza con casi todos sus electrones. La interacción con el material se describe como una secuencia de

colisiones entre pares de átomos individuales. Puede suceder que en una sola colisión el proyectil ceda gran parte de su energía cinética al blanco.

El frenado total es la suma del poder de frenado electrónico y nuclear, y se expresa de la siguiente manera:

$$\left(-\frac{dE_1}{dx}\right)_t = \left(-\frac{dE_1}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE_1}{dx}\right)_n \quad (3.2.3.1)$$

El frenado total depende de la energía del proyectil E_1 y del número atómico del proyectil y del blanco.

El frenado nuclear es importante cuando la velocidad del proyectil es baja, mientras que a velocidades mayores, el frenado electrónico será el dominante.

3.2.4 Trayectoria y alcance

Cuando un ion o proyectil de energía cinética inicial E_0 incide en un blanco determinado, pierde velocidad al desplazarse en su interior. Durante la trayectoria, y cuando su velocidad es alta, sufre ligeras desviaciones como consecuencia del frenado electrónico; sin embargo al disminuir su velocidad, las desviaciones serán más notables como consecuencia del frenado. Por su carácter aleatorio, la trayectoria es intrincada, tridimensional y no hay dos trayectorias iguales para dos iones distintos.

Se define como alcance lineal R_L a la distancia total recorrida sobre la trayectoria, desde el punto de incidencia hasta que el proyectil se detiene. Depende de la energía cinética de incidencia del ion E_0 ; es decir, a mayor energía de incidencia, mayor alcance lineal. El alcance lineal se relaciona con el frenado de la siguiente manera:

$$R_L(E_0) = \int_{E_0}^0 \left(-\frac{dE_1}{dx}\right)^{-1} dE_1 \quad (3.2.4.1)$$

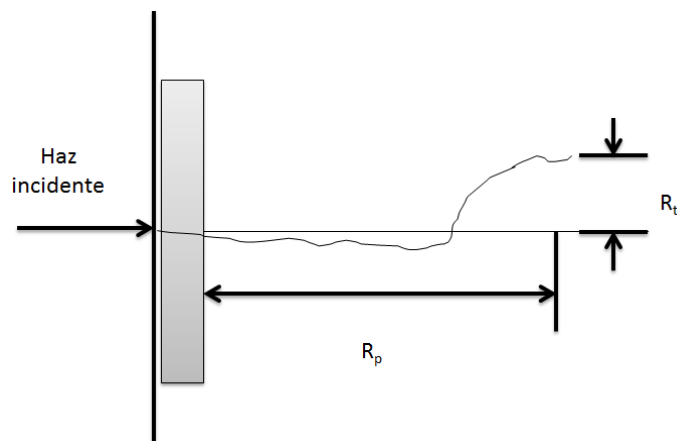


Figura 3.2.4. Trayectoria típica de un ion pesado en un material. Se observa la diferencia entre el frenado electrónico al inicio de su trayectoria y el frenado nuclear al final de ella.

En la figura 3.2.4.1 se muestra un esquema de la trayectoria de un ion dentro de un material. El alcance proyectado R_p es la proyección del alcance lineal en la dirección del ion incidente y representa la profundidad a la cual el ion se detiene dentro del material. Esta es la cantidad más relevante y la más fácilmente medible en la implantación de iones. El alcance transversal R_t es la proyección de R_L en dirección perpendicular al ion incidente. Está relacionado con la energía de desplazamiento E_d , que es la energía que se debe transferir a un átomo para producir su desplazamiento permanente sin que haya posibilidad de recombinación (Ziegler et al., 1985).

En ocasiones un ion puede provocar cascadas de desplazamientos, tal como se observa en la figura 3.2.4.2. Cuando esto sucede cerca de la superficie, algunos átomos son expulsados del material. La cascada constituye una región rica en vacancias.

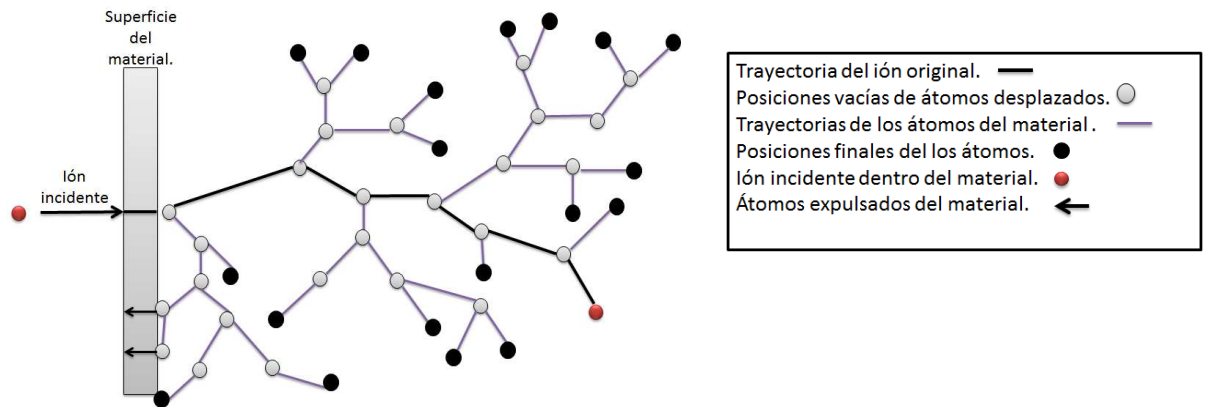


Figura 3.2.4.2. Forma de cascada de desplazamientos.

3.2.5 Defectos en la estructura cristalina

Un cristal se define como un sólido que repite periódicamente un modelo atómico en tres dimensiones, presentando un orden definido a corto y largo alcance. Los sólidos cristalinos tienen sus átomos colocados en una estructura básica llamada celda unitaria, la cual se repite muchas veces en todas direcciones. Las celdas unitarias se unen para formar la red cristalina. (Smith, 2006).

Las estructuras cristalinas no son perfectas, en ellas se encuentran impurezas que influyen en el proceso de cristalización y deforman la red espacial del cristal. Estos defectos también pueden aparecer en los materiales por calentamiento, irradiación, corte o procesos químicos. Todos los defectos introducen pequeñas deformaciones en la red que afectan las propiedades del sólido. (Rickards, 2001; Smith, 2006). Los defectos producidos por irradiación pueden ser de varios tipos, tal como se muestra en la figura 3.2.5.1 y se definen a continuación:

Vacancias: También llamado defecto Schottky. Se define como la ausencia de un átomo de su posición en la red cristalina. Si un átomo de la red es golpeado con la energía suficiente para moverse de su posición original, dejará una vacancia.

Intersticial: Es un átomo del mismo material o impureza que, en lugar de estar en una posición regular en la red cristalina, se encuentra en una posición intermedia.

Par de Frenkel: Es un defecto vacancia-intersticial. Es una vacancia de la red creada al remover un átomo desde su lugar y colocarlo en una posición intersticial en la red.

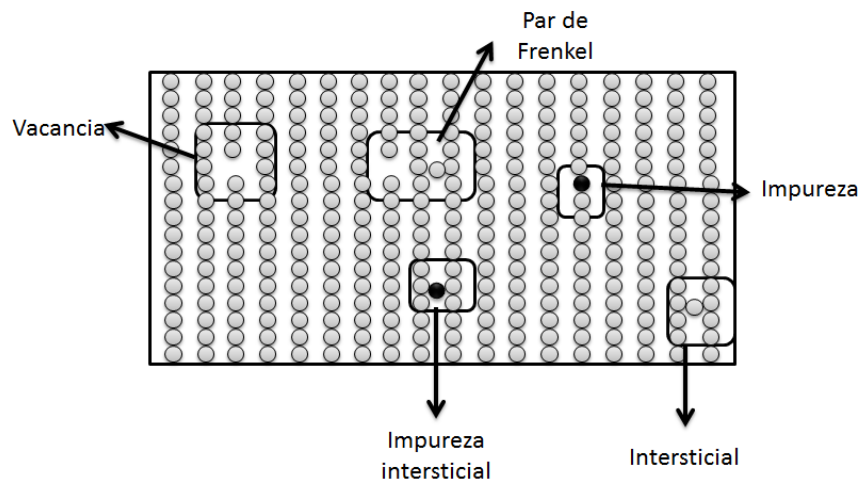


Figura 3.2.5.1. Defectos producidos dentro de una red cristalina.

Cuando se implanta un ion dentro de un material que tiene estructura cristalina, éste se acomodará dentro de la red cristalina. Si recibe energía, puede transferirla al siguiente átomo, que a su vez transfiere parte de su energía al siguiente y así sucesivamente provocando un desplazamiento a cierta distancia del átomo original. Si la dirección del haz de los proyectiles es paralela a los planos cristalinos del material, el proyectil puede viajar a través de los espacios entre estos planos y penetrar distancias mucho mayores que el alcance proyectado, hasta ser deslocalizados por una impureza o un defecto del cristal, a este fenómeno se le conoce como canalización (Rickards, 2001).

Existen métodos para simular el comportamiento de los iones incidentes en un blanco, su trayectoria y su alcance. Uno de ellos es el código TRIM, por sus siglas en inglés de *Transport of Ions in Matter*, el cual consiste en la simulación del paso de iones por la materia utilizando el método de Monte Carlo. Este código conforma una serie de procedimientos que analizan las distribuciones de las variables aleatorias, con las cuales es posible efectuar una simulación de experimentos con muestreos estadísticos. Es aplicable a sistemas estocásticos o determinísticos, tales como la implantación iónica.

El método Monte Carlo asigna una probabilidad a cada evento que puede ocurrir durante el fenómeno que se describe; se identifican aquellas variables cuyo comportamiento aleatorio determina el comportamiento global del sistema y se les asigna una probabilidad de ocurrencia. Ya identificadas las probabilidades para cada actividad posible en el sistema durante el paso del proyectil, por ejemplo generación de vacantes, cascadas y otros procesos, se lleva a cabo una simulación de lo que sucede experimentalmente para cada ion que llega al material; esta simulación consiste en generar un número aleatorio, cuyo valor se compara con los intervalos de valores asociados con cada actividad. Una vez determinada la actividad, se supone que ésta actúa sobre el ion y lo deja en una nueva condición, lo que genera nuevos valores para las condiciones del ion. Con las nuevas condiciones se vuelve a repetir el proceso sucesivamente hasta que el ion queda en reposo. Tras repetir el experimento una determinada cantidad de veces, se tiene la misma cantidad de observaciones sobre el comportamiento del sistema, lo cual es importante para entender el efecto del ion en un material. El análisis será mucho más preciso cuanto mayor sea el número de eventos que se lleven a cabo.

El código TRIM permite efectuar una visualización estadística de las trayectorias individuales de los iones. También hace un registro de algunos parámetros como el alcance proyectado, la ionización producida a lo largo de la trayectoria y el número de desplazamientos atómicos producidos o el daño. Al final se obtienen curvas de distribución de estos parámetros en función de la profundidad de los iones dentro del blanco. Este código es empleado en el programa SRIM (*The Stopping and Range of Ions in Matter*), el cual es el de mayor uso para la simulación de efectos de la irradiación con iones de un material (Ziegler et al., 1985; Rickars, 2001).

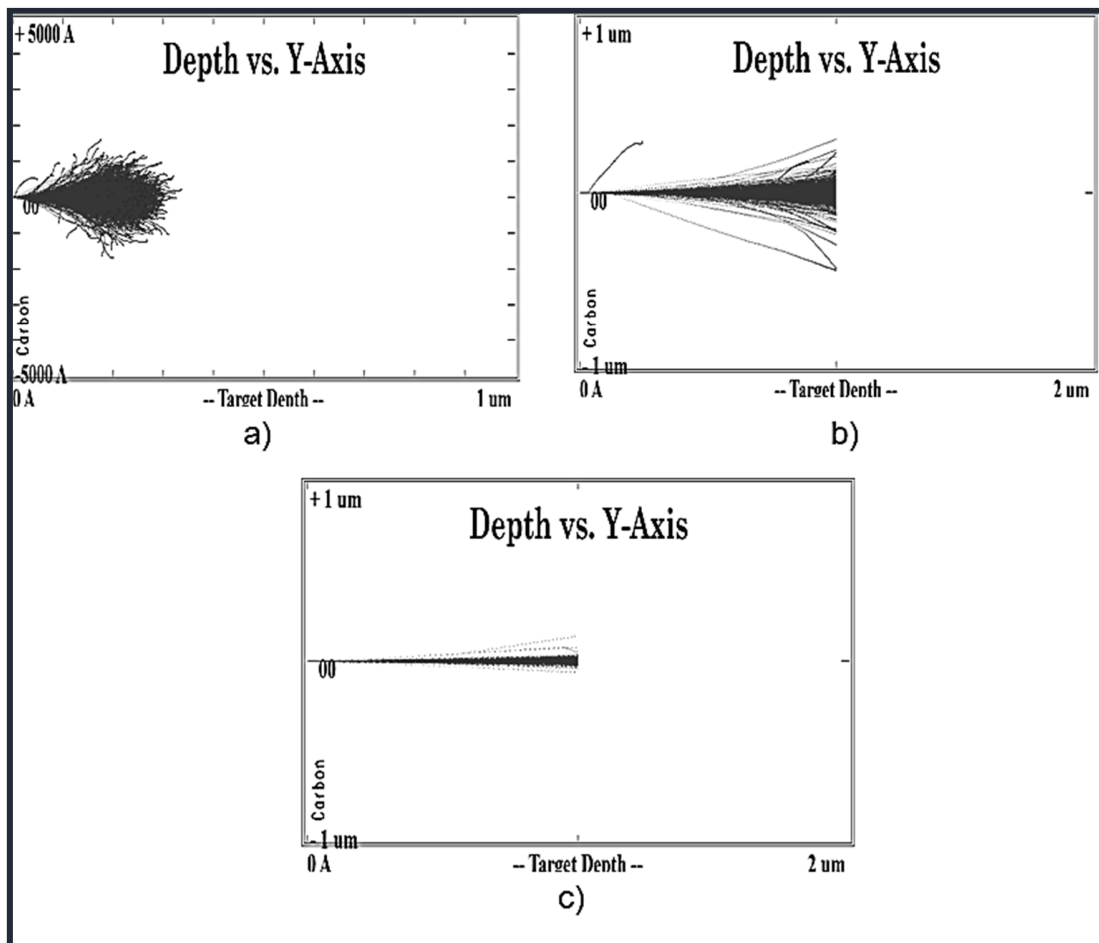


Figura 3.2.5.2. Simulación utilizando el programa SRIM para iones de carbono implantados en carbono sólido a diferentes energías de implantación:

(a) 0.1 MeV, (b) 1 MeV y (c) 3 MeV.

A continuación se presentan algunas simulaciones realizadas con el programa SRIM en las que se muestra la trayectoria y la profundidad de implantación de iones en un determinado material.

En la figura 3.2.5.2 se muestra la simulación de iones de carbono implantados en carbono a energías de 0.1, 1 y 3 MeV respectivamente. Se observa que para un mismo ion irradiado en un mismo material a menor energía de implantación la trayectoria que siguen los iones al penetrar en el material es difusa y el alcance de estos iones es corto. Al aumentar la energía de implantación, la trayectoria de los iones se asemeja más a una línea recta, proporcionando un mayor alcance de los iones dentro del material y que estos converjan en un mismo sitio.

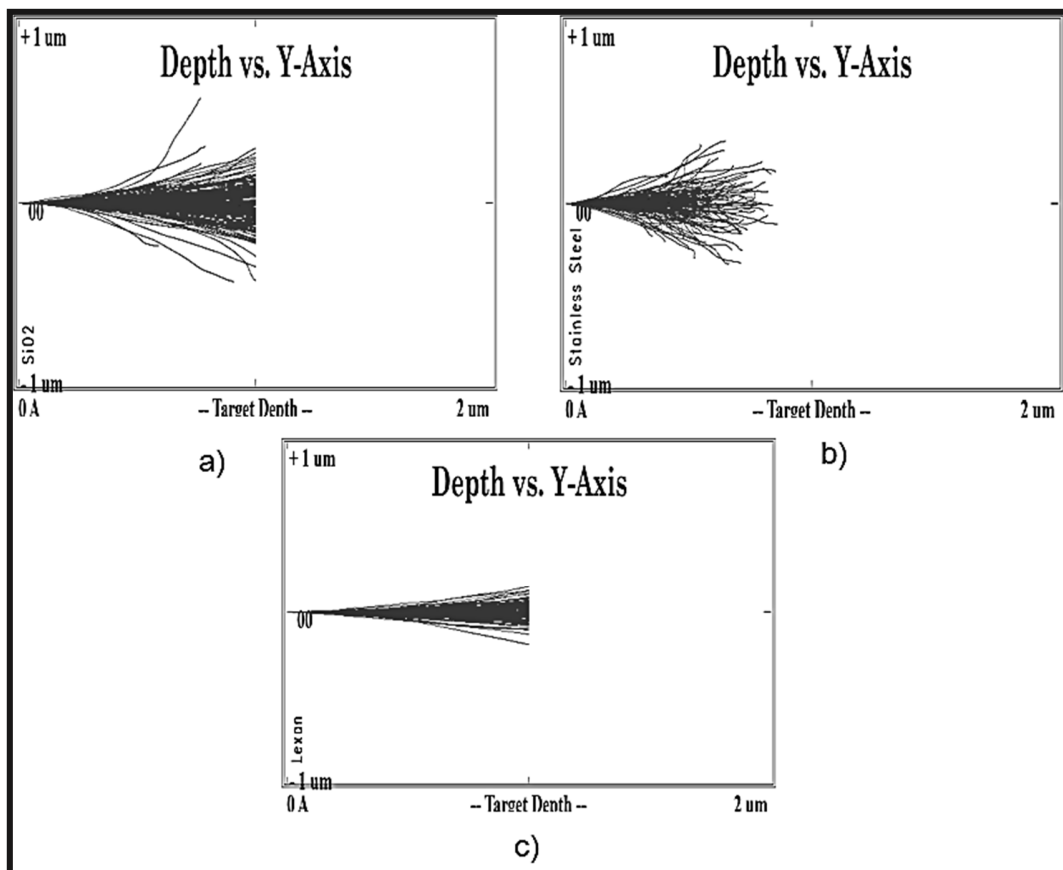


Figura 3.2.5.3. Simulación utilizando el programa SRIM para iones de plata implantados a 3 MeV en diferentes materiales: (a) cuarzo, (b) acero inoxidable y (c) policarbonato.

Al implantar un ion a una determinada energía en diferentes materiales se observa, mediante el uso del programa SRIM, la dependencia del alcance y la trayectoria del ion con respecto a la dureza del material. Cuando un material presenta mayor dureza la trayectoria de un ión se ve mayormente afectada en comparación con otros materiales de menor dureza. En la figura 3.2.5.3 se observa que para iones de plata implantados con una energía de 3 MeV en policarbonato, la trayectoria de los iones dentro del material sigue prácticamente una línea recta y presentan mayor alcance en comparación con materiales más duros como el cuarzo y el acero inoxidable, en donde los iones son desviados en mayor medida de su trayectoria original; además tienen menor alcance, por lo que los iones quedan implantados a menor profundidad dentro del material.

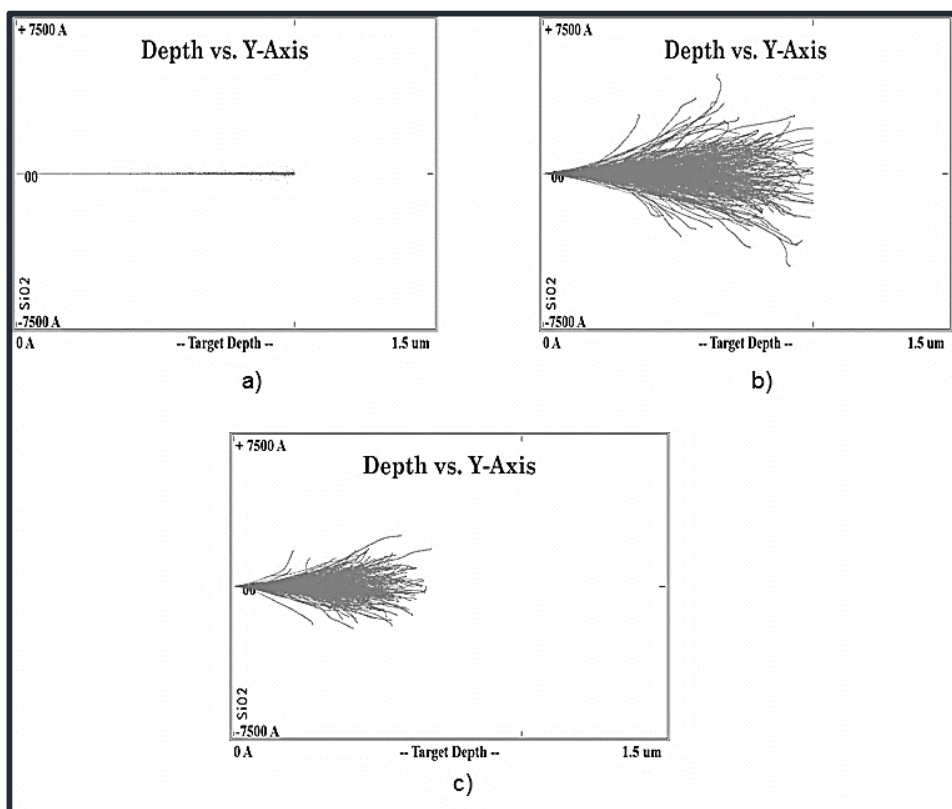


Figura 3.2.5.4. Simulación utilizando el programa SRIM para diferentes iones implantados a 1 MeV en cuarzo: (a) hidrógeno, (b) galio y (c) plata.

El alcance y la trayectoria que presenta un ion al ser implantado dentro de un material depende fundamentalmente de tres factores: la energía de implantación, el material en que se implantan los iones y el tipo de ion. En la figura 3.2.5.4 se muestra la simulación de la implantación de tres tipos diferentes de iones: hidrógeno, galio y plata, sobre un sustrato de cuarzo con una energía de 1 MeV. Se observa que un ion más ligero no presenta desviaciones en su trayectoria con respecto a su trayectoria original, como el hidrógeno, en cambio, iones más pesados tienden a presentar desviaciones en su trayectoria durante el paso de estos por el material con respecto a la trayectoria original. También se puede observar que para iones más ligeros se tendrán mayor alcance que para iones más pesados. En el caso de la plata, este ion es el que presenta menor profundidad de implantación en comparación con el galio y el hidrógeno.

3.3 Retrodispersión de Rutherford (RBS)

La retrodispersión de Rutherford o RBS por sus siglas en inglés *Rutherford Backscattering Spectrometry* es una técnica no destructiva que sirve para realizar el análisis elemental de los materiales. El nombre proviene de las investigaciones realizadas por el físico Ernest Rutherford con las cuales llegó a establecer su modelo atómico. A esta técnica también se conoce como retrodispersión de iones.

La técnica RBS consiste en colocar un blanco del material a analizar frente a un haz monoenergético de iones ligeros, como partículas alfa (${}^4\text{He}^{2+}$) o protones. Los iones interactúan con los átomos del blanco y son retrodispersados a un ángulo θ , para posteriormente ser detectados y analizados. Como consecuencia de la interacción, una parte de la energía de la partícula incidente se transfiere al núcleo del átomo del material; de esta manera la partícula retrodispersada contiene información del blanco, pues la reducción de la energía de la partícula incidente depende de las masas del proyectil y del núcleo. RBS se utiliza para determinar el espesor de películas delgadas, la composición elemental de un material así como el perfil de concentración; esta técnica es muy útil para obtener la concentración de impurezas en un material. (Skoog et al., 2008).

3.3.1 Fundamentos de la espectroscopía RBS

Cuando un haz de iones con energía (E_0) incide en un material o blanco, los iones retrodispersados pierden energía como consecuencia del choque, de tal manera que la energía final (E) de los iones después del choque es:

$$E = KE_0 \quad (3.3.1.1)$$

Donde K es el factor cinemático de dispersión; el cual proporciona información acerca de la masa del átomo blanco.

Durante los procesos de interacción entre el proyectil y el blanco, se considera que las colisiones entre ellos son de tipo elástico, por lo que tanto la energía como el momento lineal se conservan. A partir de esta consideración es posible calcular K , tal como se muestra en la figura 3.3.1.1.

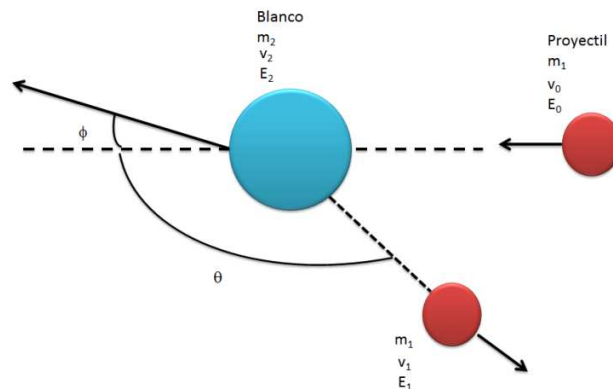


Figura 3.3.1.1. Diagrama para calcular el factor cinemático de dispersión en un experimento RBS.

En la figura 3.3.1.1 se muestra una partícula de masa m_1 , velocidad v_0 y energía E_0 que choca elásticamente con otra partícula (blanco) de masa m_2 que se encuentra en reposo.

La energía cinética de la partícula con masa m_1 es $E_0 = \frac{1}{2} m_1 v_0^2$. Después de la colisión la partícula incidente o el proyectil sale retrodispersado a un ángulo θ con una velocidad v_1 y una energía E_1 . El átomo blanco se dispersa hacia adelante con un ángulo ϕ , adquiriendo una velocidad v_2 y una energía E_2 .

La conservación de la energía y el momento lineal paralelo y perpendicular a la dirección de incidencia están expresados por las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{2} m_1 v^2 = \frac{1}{2} m_1 v_1^2 + \frac{1}{2} m_2 v_2^2 \quad (3.3.1.2)$$

$$m_1 v = m_1 v_1 \cos \theta + m_2 v_2 \cos \phi \quad (3.3.1.3)$$

$$0 = m_1 v_1 \sin \theta - m_2 v_2 \sin \phi \quad (3.3.1.4)$$

La razón de las energías antes y después de la colisión para $m_1 < m_2$, o factor cinemático de dispersión es:

$$K = \left(\frac{m_1 \cos \theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta}}{m_1 + m_2} \right)^2 \quad (3.3.1.5)$$

El factor cinemático de dispersión muestra que la energía después de la colisión está determinada únicamente por la masa del átomo del proyectil y del blanco, así como del ángulo de retrodispersión. De la ecuación (3.3.1.5) se deduce que para átomos blanco pesados los iones pierden poca energía, mientras que los átomos ligeros absorben mucha de la energía incidente. Para los iones o proyectiles incidentes pesados, la pérdida de energía es mayor, esto también sucede para ángulos mayores (Miranda, 1996).

Otro factor muy importante en la retrodispersión de Rutherford es la sección eficaz. Esta cantidad es proporcional a la probabilidad de que un ion incidente sea retrodispersado a un ángulo θ dentro de un ángulo sólido Ω una vez que se lleva a cabo la colisión. Para obtener la relación de la sección eficaz, consideremos un experimento de dispersión de partículas como el que se muestra en la figura 3.3.1.2.

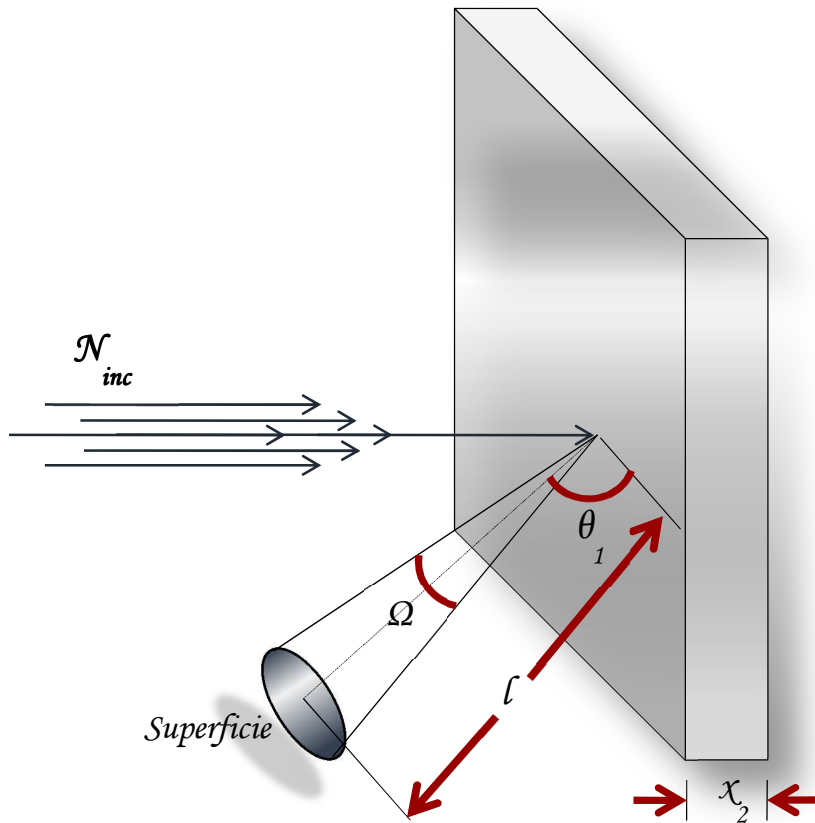


Figura 3.3.1.2. Experimento de dispersión.
Definición de sección eficaz.

En el experimento de dispersión ilustrado en la figura 3.3.1.2, el detector subtende un ángulo sólido Ω y está colocado a un ángulo θ_1 con respecto al haz incidente. En un lapso de tiempo, un gran número de proyectiles ($N_{incidente}$) bombardea al blanco; de éstos, algunos se dispersan hacia el detector (N_{disp}). A partir de aquí es posible obtener una relación entre los iones incidentes y los dispersados, tal como se muestra en la ecuación (3.3.1.6).

$$\frac{N \text{ disp}}{N \text{ incidente}} = \sigma (\theta_1) n \Omega \quad (3.3.1.6)$$

Donde $\sigma (\theta_1)$ es la sección eficaz y representa la probabilidad de que cada centro dispersor produzca una dispersión a un ángulo θ_1 , n es la densidad del blanco y Ω es el ángulo sólido.

Si Q es el número total de partículas que chocan contra la muestra y dQ el número de estas partículas registradas por el detector, entonces la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$ se define como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{Nt} \left[\frac{1}{Q} \left(\frac{dQ}{d\Omega} \right) \right] \quad (3.3.1.7)$$

Donde Nt es la densidad areal o número de átomos del blanco por unidad de área.

Considerando una colisión elástica y una interacción coulombiana entre el ion y el átomo del blanco, se puede expresar la sección eficaz diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ en el sistema de laboratorio como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_0 \sin^2 \theta} \right]^2 \frac{\left[(m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} + m_1 \cos \theta \right]^2}{[m_2^2 - m_1^2 \sin^2 \theta]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.3.1.8)$$

donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y del blanco respectivamente, e la carga del electrón, E_0 la energía del ion antes de la colisión y θ el ángulo de dispersión. A esta sección eficaz también se le conoce como sección de Rutherford (Chu et al., 1978; Miranda, 1996; Rickards, 2001).

Ya establecida la sección eficaz es posible obtener una relación entre los diferentes parámetros experimentales:

$$A = \sigma \Omega Q N t \quad (3.3.1.9)$$

donde A es el número de partículas registradas.

De esta manera es posible realizar el análisis cuantitativo de la concentración de la muestra (Rickards, 2001).

3.3.2 Análisis de las muestras

Cuando se lleva a cabo un experimento RBS, casi todas las partículas incidentes quedan dentro del blanco y sólo algunas son retrodispersadas. De la cantidad de partículas restrodispersadas sólo una mínima cantidad es capaz de llegar hasta el detector y posteriormente al sistema de amplificación y al analizador multicanal, que es donde se obtiene la información de las partículas retrodispersadas. El analizador multicanal subdivide la información que le llega en una serie de incrementos iguales, que son llamados canales. Cada evento cuya magnitud cae en un canal en particular es registrado como una cuenta. Cuando termina el experimento cada canal registra un número de cuentas, al final se obtiene una serie de cuentas contenidas en distintos canales. Con la ayuda de una computadora se obtiene el espectro RBS (Miranda, 1996).

La forma y altura (número de cuentas por canal) del espectro contienen información cuantitativa del material. La posición de la señal con mayor energía para cada elemento corresponde a los iones dispersados por la superficie del material.

Uno de los casos más simples para obtener la concentración elemental de una muestra, es cuando ésta es un blanco grueso monoelemental. A partir de las ecuaciones (3.3.1.5) y (3.3.1.9) es posible determinar su concentración, ayudándonos de la figura 3.3.2.1.

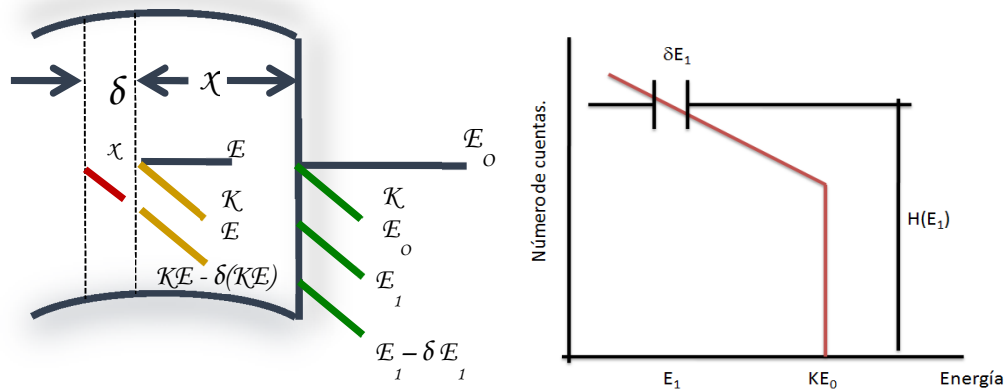


Figura 3.3.2.1. Geometría y espectro RBS correspondiente a un blanco grueso.

Como se observa en la figura 3.3.2.1, los proyectiles inciden sobre la muestra con una energía E_0 . Algunos de ellos serán retrodispersados por los átomos de la superficie del blanco y se detectarán con una energía KE_0 . Los iones que no sean retrodispersados por los átomos superficiales, entrarán al material y viajarán a través de él perdiendo gradualmente su energía hasta que encuentren un átomo dispersor localizado a una profundidad x y sean restrodispersados con una energía KE . Este ion retrodispersado saldrá del material, pero en su camino de salida seguirá perdiendo energía al interactuar con los electrones de los átomos del blanco. Al salir del material, el ion incidente será detectado con una energía E_1 que es menor a la energía KE_0 . Al conocer las energías de salida de los iones incidentes, es posible generar el espectro RBS que toma la forma de una especie de escalón y se observa en el lado derecho de la figura 3.3.2.1.

Como la sección eficaz es inversamente proporcional a la energía del proyectil se tiene que a menor energía del proyectil será mayor la probabilidad de colisionar y se tendrán, por lo tanto, un mayor número de registro de eventos (Chu et al., 1978; López-Suárez, 2004; Miranda, 1996).

Cuando el blanco es una película delgada formada por dos elementos, se puede obtener una relación directa entre el área del espectro y el espesor de la película de acuerdo con la figura 3.3.2.2, en donde A y B son los elementos que componen a la película delgada, que se localiza sobre un sustrato C. Para simplificar se considera que la masa m_A y el número atómico Z_A del elemento A son mayores que la masa m_B y el número atómico Z_B del elemento B. La masa m_C del sustrato C es menor a la de A y B.

Al incidir iones de Energía E_0 sobre la muestra a un ángulo θ_1 , estos iones pueden ser retrodispersados con una energía $E_1^A = K_A E_0$ al colisionar con un átomo en superficie del elemento A o con energía $E_1^B = K_B E_0$ si lo hacen con un átomo superficial del elemento B. De la misma manera que en el caso del blanco grueso, los iones que no sean retrodispersados en superficie, entrarán a la película delgada y colisionarán en su interior con algún átomo del elemento A o B, se retrodispersarán y saldrán del blanco con una energía menor. Cuando los iones atraviesan toda la película delgada sin sufrir colisiones y alcanzan el sustrato C, entonces se retrodispersarán debido a átomos del elemento C y saldrán de la muestra registrando cuentas debidas a los átomos del sustrato. Entonces se generan dos clases de conteos, de derecha a izquierda de acuerdo a la figura 3.3.2.2, los de los elementos A y B, generalmente en forma de picos, y un escalón para el sustrato.

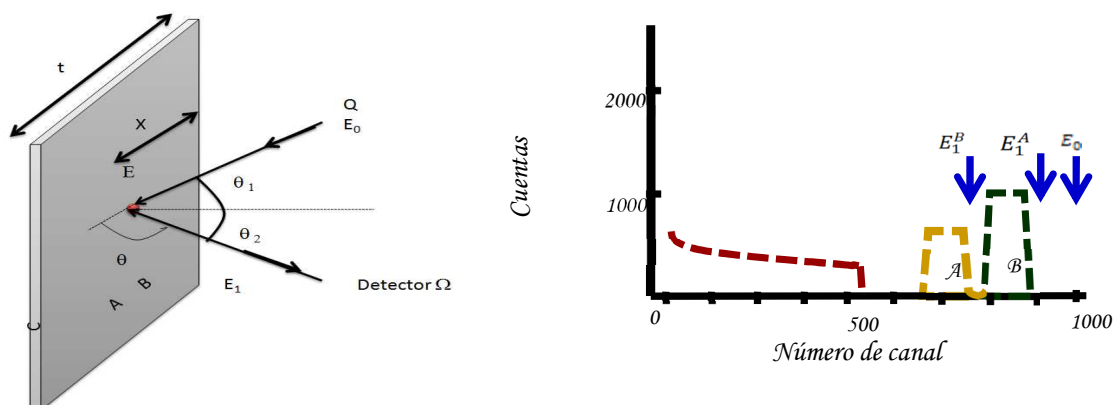


Figura 3.3.2.2. Geometría de un experimento RBS y su espectro de una película delgada compuesta por dos elementos A y B sobre un sustrato C más ligero.

Para obtener el número total de cuentas correspondiente a los elementos A y B y posteriormente la concentración de cada elemento, se utilizan las siguientes ecuaciones:

$$H_A = \frac{Q\sigma_A(E,\theta)\Omega N_A t}{\cos \theta_1} \quad (3.3.2.1)$$

$$H_B = \frac{Q\sigma_B(E,\theta)\Omega N_B t}{\cos \theta_1} \quad (3.3.2.2)$$

donde H_A y H_B son el número total de cuentas en los picos del elemento A y B, respectivamente, Q es el número total de iones incidentes en el blanco, Ω es el ángulo sólido del detector, t es el espesor de la película que es proporcional al ancho de los picos, $\sigma_A(E,\theta)$ y $\sigma_B(E,\theta)$ son las respectivas secciones eficaces de dispersión en función de la energía del proyectil E antes de la colisión y θ el ángulo de retrodispersión. N_A y N_B son las densidades atómicas de los elementos A y B en la película delgada en [átomos / cm³] (Chu et al., 1978; Miranda, 1996).

3.3.3 Secciones no Rutherford

En ocasiones, los espectros RBS no proveen la información necesaria para obtener la concentración elemental de sus componentes; esto se debe básicamente a dos factores: la sección eficaz del elemento a estudiar es muy pequeña o se presenta una resolución pobre debido a que los elementos presentes en la muestra tienen números atómicos cercanos, superponiéndose los espectros. Este problema puede resolverse incrementando la energía del proyectil; sin embargo este hecho trae consigo ciertos inconvenientes, pues la sección eficaz de Rutherford ya no se comporta de la forma habitual y se transforma en una sección No Rutherford (López-Suárez, 2004).

3.4 Fotoluminiscencia

Si un átomo es irradiado con una onda electromagnética pasa de un estado de equilibrio a un estado electrónico excitado o de mayor energía. En ocasiones esta energía absorbida se disipa en forma de calor, mediante colisiones con átomos o moléculas vecinas; otras veces la energía absorbida se disipa emitiéndose en forma de radiación electromagnética. Al proceso de emisión de radiación previamente absorbida en un átomo se le denomina luminiscencia. Si la excitación se lleva a cabo por la absorción de fotones, este proceso de emisión se le denomina fotoluminiscencia, la cual presenta dos variantes de acuerdo con el tiempo transcurrido entre la absorción y la emisión: fluorescencia, en la cual la emisión es prácticamente instantánea, con tiempos de retraso inferiores de 10^{-6} s después de que se produce la absorción y fosforescencia, en la que se presenta un retraso de la emisión mayor a 10^{-3} (s) (Ariza, 2003; Cortés et al., 2010).

La fotoluminiscencia es uno de los métodos más utilizados para conocer los estados electrónicos y las transiciones ópticas en los semiconductores, y es producto de la interacción entre los portadores de carga. Para fines prácticos, el proceso de fotoluminiscencia se puede dividir en tres etapas (figura 3.4.1):

En la primera el átomo pasa de su estado base, en el cual la banda de conducción está vacía y la de valencia llena, a un estado excitado; creando así pares electrón-hueco, transfiriendo electrones de la banda de conducción a la banda de valencia. Posteriormente, en la segunda etapa, los pares electrón-hueco transfieren su energía a la red cristalina en forma de vibraciones y pasan de un estado excitado a un estado relajado y, finalmente, los pares electrón-hueco se recombinan emitiendo un fotón. (Hannewald et al., 2000; Moehl et al., 2003).

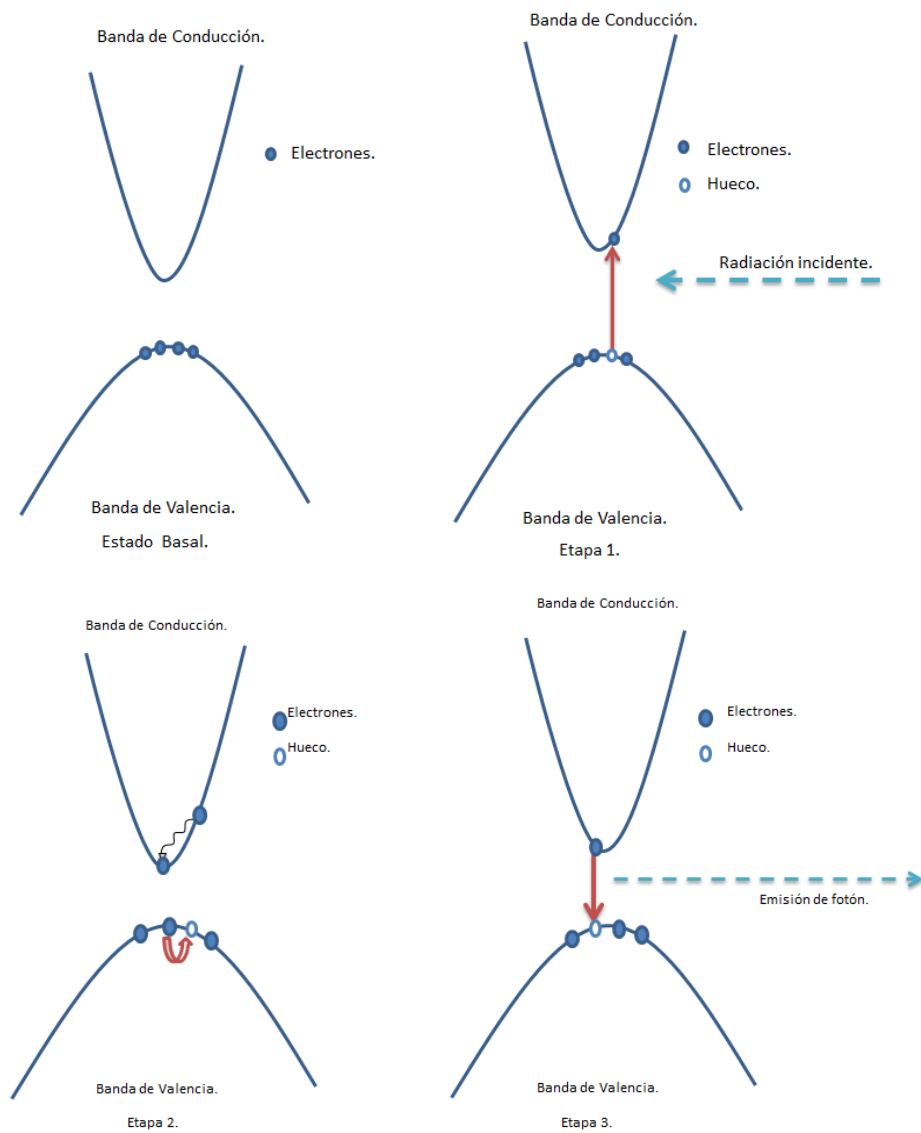


Figura 3.4.1. Esquema de los procesos básicos que intervienen en un proceso de luminiscencia típica en semiconductores.

3.4.1 Fotoluminiscencia en semiconductores

Cuando un semiconductor es irradiado con fotones, la radiación afecta a los portadores de carga, los electrones en la banda de conducción y los huecos en la de valencia. Para que se lleve a cabo el proceso de fotoluminiscencia en un semiconductor es necesario que los electrones de la banda de valencia sean excitados; por lo tanto, los fotones absorbidos deben tener una energía igual o mayor a la energía de la banda prohibida E_g . Cuando esta radiación incide sobre la superficie del material semiconductor excita a los electrones de la banda de valencia hacia los estados no ocupados de la banda de conducción generándose así un proceso de absorción, dejando un hueco en la banda de valencia; como consecuencia se crea un par electrón-hueco. Como la interacción electrón-hueco produce una recombinación, la absorción depende de la banda prohibida del semiconductor, si ésta es directa o indirecta (Pankove, 1971).

En el caso de un semiconductor de banda prohibida directa, un electrón en el máximo de la banda de valencia pasa directamente al mínimo de la banda de conducción, conservando la energía que queda expresada de la siguiente manera:

$$E = \hbar\omega = E_f - E_i \quad (3.4.1.1)$$

donde el producto $\hbar\omega$ es la energía del fotón.

Para un semiconductor de banda prohibida indirecta, el electrón excitado requiere de una energía o de un momento o cantidad de movimiento adicional para alcanzar el mínimo de la banda de conducción, la interacción con un fonon proporciona el momento requerido para alcanzar la transición energética. La energía se conserva de acuerdo con la siguiente expresión:

$$E = \hbar\omega = E_f - E_i \pm \hbar\Omega \quad (3.4.1.2)$$

donde $\hbar\Omega$ es la energía del fonon. El símbolo \pm implica que puede haber una absorción o una emisión de un fonon para que se lleve a cabo la transición del electrón de la banda de valencia a la banda de conducción. La emisión de un fonon es el proceso más favorable pues se lleva a cabo a bajas temperaturas.

En un semiconductor la fotoluminiscencia ocurre cuando un electrón excitado en la banda de conducción regresa a su estado inicial después de un tiempo determinado y al regresar emite un fotón. El proceso de desexcitación puede ocurrir por medio de dos tipos de procesos: radiativos y no radiativos. En los procesos no radiativos la energía del electrón se transfiere a la red cristalina en forma de vibraciones (fonones). Uno de los procesos no radiativos es el proceso Auger, en el cual tres portadores de carga interactúan con un centro de recombinación. En los procesos radiativos, el electrón se recombina con un hueco y genera fotones con una energía igual a la diferencia de energías entre el estado final y el inicial.

3.5 Plasmón de Resonancia

Muchas de las propiedades físicas y químicas de los materiales en bulto cambian significativamente al cambiar el tamaño de partícula, y se modifican considerablemente cuando alcanzan dimensiones nanométricas (menor a 100 nm), exhibiendo propiedades únicas que los hacen muy interesantes para aplicaciones tecnológicas. Las propiedades ópticas de los materiales también se ven afectadas por la disminución del tamaño de la partícula. Un ejemplo son las nanopartículas de metales de transición, las cuales presentan distintas coloraciones en función al tamaño de partícula (Takeda et al., 2004).

Un ejemplo claro de los cambios en las propiedades ópticas que ocurren cuando la dimensión de los materiales disminuye hasta escala nanométrica se observa en los estudios de absorción, en particular en metales como el oro, la plata y el cobre. Nanopartículas de oro, plata y cobre presentan bandas de absorción en la región del visible, mientras que los metales análogos en bulto no las presentan. Estas bandas se conocen como resonancia del plasmón de superficie (SPR) y son el resultado de la interacción de los electrones de la banda de conducción de las nanopartículas con un campo electromagnético externo; siendo la plata el metal con mayor efectividad de respuesta a la resonancia de plasmón de superficie. Esta característica óptica es un efecto de tamaño, y está ausente tanto en los átomos individuales como en los materiales en bulto. La presencia de las bandas de absorción en la región visible del espectro es responsable de los atractivos colores de algunas nanopartículas metálicas. El modelo de Mie explica este fenómeno y se basa en la solución de las ecuaciones de Maxwell para la interacción de una onda electromagnética con pequeñas esferas metálicas (Klimov et al., 2008; Kumar, 2009).

Cuando una nanopartícula esférica es irradiada con radiación electromagnética en la región del visible (luz visible), el campo eléctrico oscilante produce una oscilación coherente en los electrones de conducción, ocasionando un desplazamiento de la nube electrónica con relación al núcleo. Existe una fuerza de

atracción coulombiana entre los electrones y el núcleo, así la nube de electrones oscila en relación a la coraza del núcleo. La frecuencia de esta oscilación está determinada por diferentes factores: la densidad de electrones; la masa efectiva del electrón; el tamaño y la forma de la distribución de carga; así como de la constante dieléctrica de la nanopartícula y del medio en el cual se encuentra inmersa, la cual es predominante para determinar la posición e intensidad del pico del plasmón. (Lance-Kelly et al., 2003; Mie, 1908).

A la oscilación colectiva de electrones se le llama dipolo de resonancia del plasmón de una partícula. En la superficie de la nanopartícula se crea una diferencia de carga neta que actúa como fuerza restauradora, la cual genera una oscilación dipolar de los electrones con un periodo T (figura 3.5.1). El momento dipolar por unidad de volumen ocasiona la polarización de la nanopartícula (Hornyak et al., 2009; Kumar, 2009).

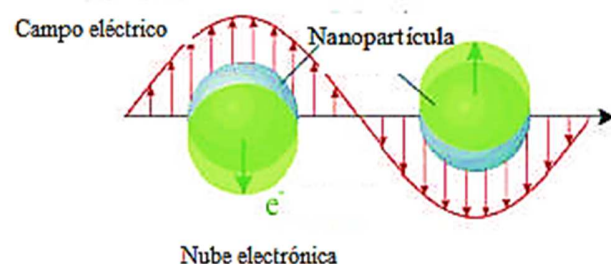


Figura 3.5.1. Esquema de la oscilación del plasmón de una nanopartícula esférica que muestra el desplazamiento de la nube de electrones de conducción con respecto al núcleo.

El campo de la tecnología que se encarga de la resonancia de plasmones de superficie se llama plasmónica. Para fines prácticos el plasmón de superficie puede verse como un tipo especial de onda de luz que se propaga a lo largo de la interfase de un metal-dieléctrico y se acopla con los electrones libres del metal; las nanopartículas regularmente espaciadas conducen la luz a través de distancias nanométricas, las cuales son mucho menores a la longitud de onda de la luz

incidente. Cuando la luz incide en la primera nanopartícula sus plasmones de superficie comienzan a resonar haciendo resonar a otros, lo cual provoca que la luz se transmita a lo largo de distancias nanométricas. Las interconexiones metálicas que soportan este tipo de ondas sirven como pequeñas guías de onda ópticas denominadas guías de onda plasmónicas. La plasmónica tiene una gran aplicación tecnológica, ya que puede ayudar a mejorar la resolución de microscopios, la eficiencia de diodos emisores de luz, la sensibilidad de detectores químicos y biológicos, así como el almacenamiento y la movilidad de grandes cantidades de datos a través de un chip (Atwater, 2007; Zia et al., 2006).

Referencias

- ALTAVILLA, C. Y CILIBERTO, E., "Inorganic Nanoparticles: Synthesis, Applications and Perspectives.", New York, CRC Press, 2011, p 1-14.
- ARIZA H., "Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica.", Rev. Acad. Colomb.Cienc.,**27** (104), 2003, p 357-368.
- ATWATER, H., "The Promise of Plasmonics.", Scientific American, 2007, p 56,-63.
- BOARDMAN, J., "The sixth-century potters and painters of Athens and their public, U.K.", Cambridge University Press, 1991, p 72-102.
- CANHAM, L., "Nanostructures of porous silicon produce multicolour luminescence by a mechanism that still defies explanation. Silicon optoelectronics at the end of the rainbow?", Physics World, 1992, p 41-44.
- CHU, W.K., MAYER, J. M. y NICOLET, M.A., "Backscattering Spectrometry", Academic Press, New York, 1978, 384p.
- CORTÉS, F., ABARGUES, R., MARTÍNEZ-PASTOR, J., PERALES, E., CHORRO, E., MARCHANTE, E., VIQUEIRA, V. Y MARTÍNEZ-VERDÚ, F., "Evaluación espectral y colorimétrica de puntos cuánticos como nuevos emisores de luz.", IX Congreso Nacional del Color Alicante, Universidad de Alicante, 2010.
- HANNEWALD, K., GLUTSCH, S. Y F., BECHSTED, Phys. Rev, 2000, B **61**, p 10792-10802.
- HERNÁNDEZ-MANGAS, J.M., "Simulación de implantación iónica en semiconductores.", Universidad de Valladolid, Departamento de Electricidad y Electrónica, 2000, p 192.
- HORNYAK, G., TIBBALS, H., DUTTA, J. Y MOORE, J., "Introduction to Nanoscience and Nanotechnology.", CRC Press, New York, 2009, p 970-979.
- HUHEEY, J., KEITER, E. Y RICHARD, K. "Química Inorgánica: Principios, Estructura y Reactividad.", Cuarta edición, México, Oxford University Press, 1997, p 280-291.

KLIMOV, V., ISTOMIN, Y. Y KOSEVICH, Y., "Plasma phenomena in nanostructures and neutron stars. ", Physics-Uspekhi, **51**, (8), 2008, 839-859.

KUMAR, C., "Metallic Nanomaterials.", Vol. 1., Wiley- VCH, Weinheim, 2009, p 99-109.

LANCE-KELLY, K., CORORANA, E., ZHAO, L. Y SCHATZ, C., J. Phys. Chem., **107**,(B) , 2006, p 668-677.

LÓPEZ SUÁREZ, A., "Estudio comparativo de la absorción de hidrógeno en Ti y Ti-6Al-4V utilizando técnicas de origen nuclear.", Posgrado en Ciencias Físicas, UNAM, 2004, p 189.

MANIATIS, Y., ALOUPI, E., Y STALIOS. A.D., "New evidence for the nature of Attic black gloss.", Archaeometry, **35**, 1992, p23-34.

MOEHL, S., ZHAO, H., DAL DON, B., WACHTER, S., Y KALT, H., Journal of Applied Physics, **93**, 2003, (10), p 6265-6275.

MIE, G., Ann. Phys., **25**, 1908, p 377.

MIRANDA MARTIN DEL CAMPO, J., "Técnicas analíticas de origen nuclear: un curso introductorio.", Departamento de Física Experimental, Instituto de Física, UNAM, México, 1996, p 81.

MORRIS, P. R., "A history of the world semiconductor industry", Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom, 1999, p 12-70.

NASTASI, M., MAYER, J. y HIRVONEN, J., "Ion-solid interactions: fundamentals and applications.", Cambridge University Press, New York, 1996, p 1-51.

NAVARRO CHÁVEZ, O., Ciencia de materiales y nanotecnología, Vol. 2, Morelia, Instituto de Investigación en Materiales, UNAM, 2006, p 141-180.

PAVESI, L. Y TURAN, R., "Silicon Nanocrystals: Fundamentals, Synthesis and Applications.", Weinheim, Wiley-VCH, 2010, p 43-68.

PATTERSON, J. Y BAILEY, B., "Solid-State Physics: Introduction to the Theory, second edition.", New York, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010, p 295-353.

PANKOVE, J.I., "Optical processes in Semiconductors.", Prentice- Hall, Inc., New Jersey, 1971, p 402.

PELAEZ, L., JARAIZ, M., GLIMER, G.H., GOSSMANN, H.J., RAFFERTY, C.S., EAGLESHAM, D. J. y POATE, J.M., "B diffusion and clustering in ion implanted Si: The role of B cluster precursors.", *Appl. Phys. Lett.*, **70**, (17), 1998, p 2285-2287.

PEÑA, O., CHEANG-WONG, J.C., RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, L., ARNEAS-ALATORRE, J., CRESPO-SOSA, A., RODRÍGUEZ-IGLESIAS, V. Y OLIVER, A., "Metal and metal oxide nanoparticles produced by ion implantation in silica: A microstructural study using HRTEM", *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, **B 257**, 2007, p 99-103.

PERKOWITZ, S., "Optical Characterization of Semiconductors: Infrared, Raman and Photoluminescence Spectroscopy.", Academic Press, London, 1993, 16-32p.

PLUMMER, J., DEAL, M. Y GRIFFIN, P. "Silicon VLSI Technology: Fundamentals.", Practice and Modeling, New Jersey, Prentice Hall, 2000, p XI-XIV.

RICKARDS CAMPBELL, J., "La física de las radiaciones en la material.", Dirección General de Divulgación de la Ciencia UNAM, 2001, p 1-1 a 23-1.

RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ, L., "Aceleradores de partículas: irradiación con iones y electrones", 6° Escuela Mexicana de Física Nuclear, Instituto de Física, UNAM, 2009, p21- 38.

SHOCKLEY, W., "Forming semiconductor devices by ionic bombardment.", US Patent 2787564. Technical report, Bell Laboratories, 1954.

SKOOG, D., HOLLER, F. J. y CROUCH, S. R., "Principios de análisis instrumental.", 6° ed., México, Cengage Learning, 2008, p 603-605.

SMITH, W.F., "Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales.", cuarta edición, Mc Graw Hill, México, 2006, p 72-87.

SZE, S.M., "VLSI Technology.", McGraw-Hill, New Jersey, 1983, p 381-420.

TAKEDA, Y., LU, J., OKUBO, N., PLAKSIN, O., SUGA, T. Y KISHIMOTO, N., "Optical properties of metal nanoparticles synthesized in insulators by negative ion implantation.", *Vacuum*, **74**, 2004, p 717-721.

West, A., "Solid state chemistry and its applications.", London, John Wiley & Sons, 1987, p 2012-262.

ZIA, R., SCHULLER, J., CHANDRAN, A. Y BRONGERSMA, M., *Materials Today*, **9**, (7B), 2006, p 20-27.

ZIEGLER, F.,BIERSACK, J.P.YLITTMARK, U., "The Stopping and Range of Ions in Solids.", Pergamon, New York, 1985, p 321.

The Database TheRRUFF™<http://www.rruf.info>. Noviembre 2012.

The Database Merck™<http://themerckindex.chemfinder.com>. Noviembre 2012.

4. Desarrollo experimental

4.1 Acelerador Pelletron

Un acelerador de partículas es un dispositivo que permite cambiar la velocidad de partículas cargadas, aumentando su energía cinética o modificando la dirección de su movimiento. El acelerador Pelletron es un acelerador electrostático que genera una alta diferencia de potencial en una terminal de alto voltaje, la cual está acoplada a un tubo acelerador que se encuentra al vacío, y por el que se mueven las partículas durante su aceleración. Este tubo está integrado a un sistema de placas o anillos circulares metálicos, cada uno conectado con el siguiente por medio de resistencias eléctricas por lo que se produce una diferencia de potencial constante con un campo eléctrico orientado principalmente en la dirección de la salida del tubo acelerador. Así, al salir del tubo, la partícula tendrá una energía cinética proporcional a la diferencia de potencial o tensión en la terminal. La intensidad del haz de partículas que se produce depende de la corriente de carga que proporcionen los generadores en la terminal.

El acelerador utilizado en el experimento de implantación de iones y análisis de RBS es un Pelletron de tipo TANDEM de 3 MV, modelo 9SDH-2 de *National Electrostatics Corporations (NEC)* (figura 4.1.1).

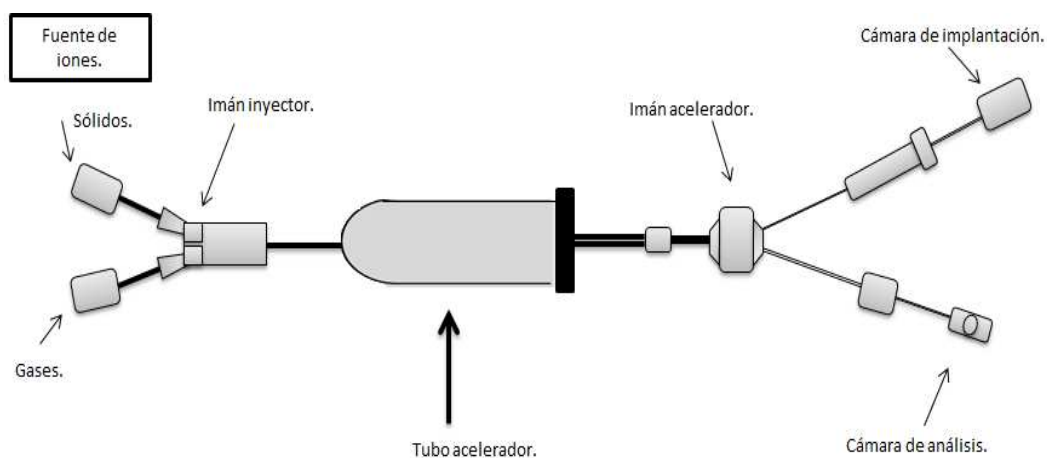


Figura 4.1.1. Esquema del acelerador Pelletron del Instituto de Física de la UNAM.

El Pelletron aprovecha en dos ocasiones el potencial de la terminal de alto voltaje y ésta es la gran ventaja de este tipo de aceleradores. Lo anterior lo realiza de la siguiente manera. La fuente de iones se encuentra en el exterior del acelerador y produce iones negativos, los cuales son acelerados hacia la terminal de alto voltaje que está cargada positivamente. Los iones negativos entran a un dispositivo llamado *Stripper*, que se encuentra a la mitad del tubo acelerador; ahí los iones son despojados de dos o más electrones, quedando con carga positiva. Al salir del *Stripper*, éstos son acelerados nuevamente debido a la repulsión eléctrica con la terminal. Al final del proceso el ion sale con un estado de carga positiva. Gracias a la doble aceleración de los iones en el Pelletron, es posible obtener iones de alta energía.

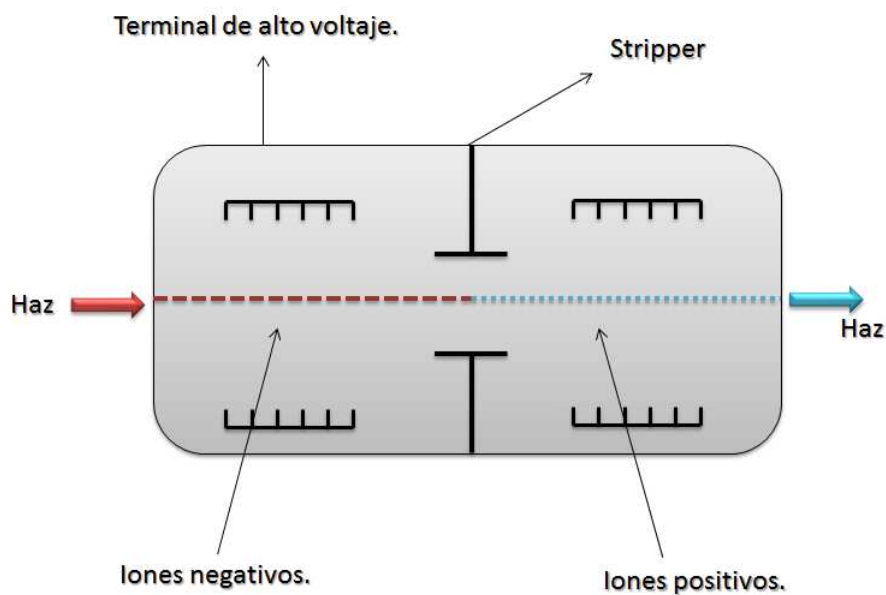


Figura 4.1.2. Esquema del *Stripper* del acelerador Pelletron. Instituto de Física UNAM.

Existen dos fuentes de iones en el Pelletron colocadas a $+30^\circ$ y -30° con respecto a la dirección del haz. Una de estas fuentes es la fuente de iones

secundarios producidos por erosión iónica a través de cesio (SNICS) y la otra es una fuente de radio frecuencia conocida como NEC Alphasross.

La fuente SNICS acelera iones a partir de sólidos, en ella se coloca un cátodo del material del cual se requieren los iones. Una parte del vapor de cesio proveniente de un horno se ioniza y es acelerado hacia el cátodo produciendo un fenómeno conocido como erosión iónica. De la erosión iónica se generan partículas positivas o neutras, estas partículas producen iones negativos al interactuar con el cesio depositado en el cátodo.

La fuente de radio frecuencia acelera iones a partir de gases. En esta fuente un gas o mezcla de gases se disocia por medio de un oscilador de radio frecuencia. Los iones positivos o neutros obtienen electrones a través de un intercambiador de rubidio, lo que los convierte en iones negativos. Posteriormente, una diferencia de potencial conduce a los iones fuera de la cámara generando un haz continuo.

Todas las líneas y conductos del sistema se encuentran en condiciones de vacío para evitar la pérdida de velocidad de los iones provocada por el choque de los iones con partículas del aire (Rodríguez-Fernández, 2009).

4.2. Preparación de muestras

4.2.1 Experimento de implantación iónica

La implantación iónica es una técnica utilizada para introducir elementos (o impurezas) a una matriz. Consiste en irradiar el material con iones, que al interactuar con los átomos del material, pierden velocidad hasta quedar alojados dentro de la matriz. La profundidad a la cual quedan implantados dependerá de la energía y el ángulo de implantación, así como de la composición de la matriz. El tipo de procedimiento de implantación puede clasificarse de acuerdo a la energía que alcanzan los iones que son bombardeados en el material. Para este caso, la

implantación de iones se realizó a alta energía, por lo que el depósito de las partículas irradiadas se localiza en el interior de la matriz.

En este experimento se llevó a cabo la implantación de iones de silicio y plata en una matriz de dióxido de silicio de alta pureza, o sílice. La energía de implantación de las partículas metálicas fue diferente para cada muestra, esto para obtener implantaciones a diferentes profundidades dentro de la matriz. El experimento se realizó en la cámara de implantación del acelerador Pelletron del Instituto de Física de la UNAM (IFUNAM).

Con el imán inyector y el imán acelerador se seleccionan exactamente los iones que se desean irradiar, de tal manera que a la cámara de implantación sólo llegan iones de un solo elemento; lo que garantiza una alta pureza durante la implantación.

En la primera parte del experimento un sustrato de sílice fabricado por NSG (Nippon Silica Glass) del tipo EDC con bajo contenido en OH (menos de 1ppm) y un total de menos de 200 ppm de impurezas, fue implantado con iones de Si²⁺ a una energía de 5 MeV y a una fluencia de 1.4×10^{17} (iones/cm²). La corriente durante el experimento se mantuvo alrededor de 800 (nA). Al finalizar la implantación de los iones de Si²⁺, el sustrato se sometió a un tratamiento térmico de recocido. El recocido sirve para generar las nanopartículas y nuclear los defectos producidos durante la implantación. Posteriormente, se dividió la muestra en cuatro partes iguales, formando cuatro cuadrados de aproximadamente 1.1 cm² de superficie. Estas muestras fueron posteriormente implantadas con iones de plata. Las condiciones experimentales de la implantación se muestran en la tabla 4.2.1.

Tabla 4.2.1.1. Implantación de iones de plata en un sustrato de dióxido de silicio.

Identificación de la muestra	Energía de implantación de iones Ag ²⁺	Afluencia [iones/cm ²]	Corriente [nA]
M0 (blanco)	-----	-----	-----
M1	1 MeV	6×10 ¹⁶	200-400
M2	3 MeV	6×10 ¹⁶	200-400
M3	1 MeV y 3 MeV	3×10 ¹⁶	200-400

Como se muestra en la tabla 4.2.1; los cuatro fragmentos del sustrato previamente irradiado con iones Si²⁺ a 5 MeV se sometieron a distintos procedimientos de implantación. La muestra M0 no se implantó con iones de plata y se mantiene como referencia. La muestra M1 fue implantada con iones de plata con una energía de 1 MeV y una afluencia de 6×10¹⁶ (iones/cm²). A la muestra M2 se le implantaron iones de plata con una energía de 3 MeV y una afluencia de 6×10¹⁶ (iones/cm²). La muestra M3 fue implantada con iones de plata a 2 diferentes energías, primero a 1 MeV y posteriormente a 3 MeV con una afluencia de 3×10¹⁶ (iones/cm²) para cada caso. Después de la implantación de los iones de plata, las muestras se sometieron a un segundo tratamiento térmico.

Durante la implantación de iones de plata, la corriente se mantuvo entre los 200 y 400 (nA) para evitar la difusión de la plata por efectos térmicos y lograr una concentración y distribución homogénea de los iones de plata en la matriz de sílice (Peña et al., 2007).

La implantación de iones se llevó a cabo a temperatura ambiente y en condiciones de vacío, esto para asegurar que no haya partículas de aire en el sistema y los iones pudieran moverse sin perder velocidad a través del acelerador hasta llegar a la muestra a implantar (figura 4.2.1.1)

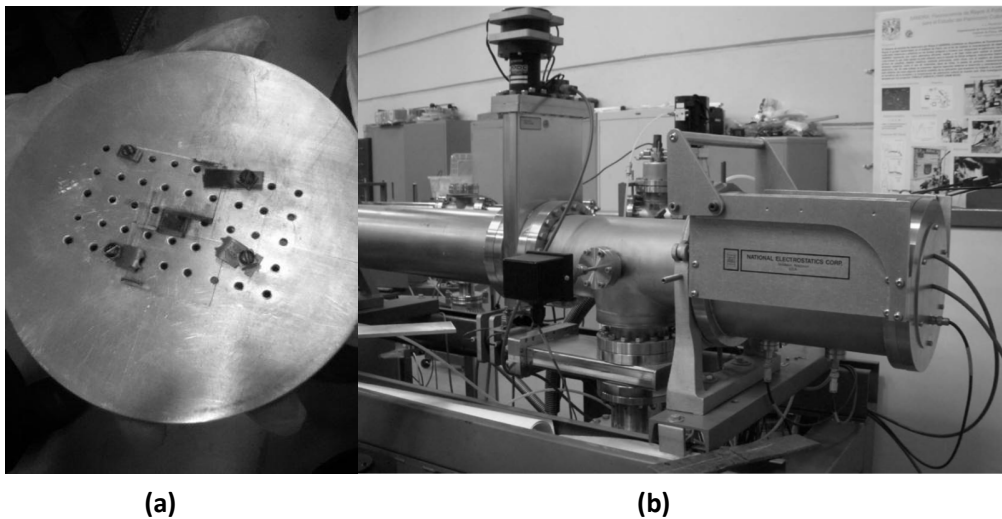
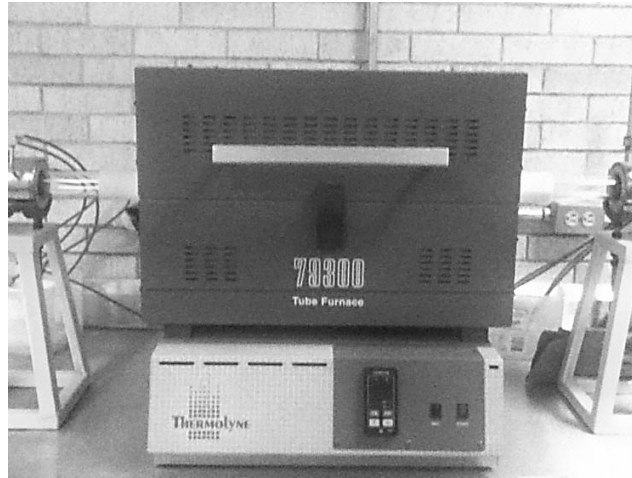


Figura 4.2.1.2. Fotografía de (a) el portamuestra y (b) la cámara de implantación de iones del acelerador Pelletron IFUNAM.

4.2.2 Tratamiento térmico

Como se mencionó anteriormente, el sustrato de sílice implantado con iones de Si^{2+} se sometió a un tratamiento térmico, posteriormente se dividió en cuatro partes iguales, tres de ellas fueron implantadas con iones de plata y al finalizar la implantación también fueron sometidas a un tratamiento térmico de recocido. Los tratamientos térmicos en su totalidad se llevaron a cabo en un horno marca Thermolyne 79300 como el que se muestra en la figura 4.2.2.1., bajo las mismas condiciones experimentales.



El tratamiento térmico de las muestras con iones de silicio consistió en su calentamiento hasta 1100°C por 1.5 horas, partiendo de 26°C y con una rampa de calentamiento de 25°C aproximadamente, en una atmósfera reductora compuesta de una mezcla de gases, hidrógeno y nitrógeno (H₂ 50% y N₂ 50%), con una velocidad de flujo de 50 (cm³/min). En el caso de las muestras con iones de plata, el recocido se llevó a cabo en el mismo sistema, usando la misma atmósfera de gases, pero con una temperatura de 600°C por 1 hora.

El sistema de calentamiento (figura 4.2.2.2) consiste en un tubo de cuarzo de 3.8 (cm) de diámetro interno y 115 (cm) de largo cubierto con un tubo de un material refractario (alúmina). Cuenta con una conexión desmontable que permite la introducción de la muestra. El tubo de cuarzo está colocado dentro del horno.

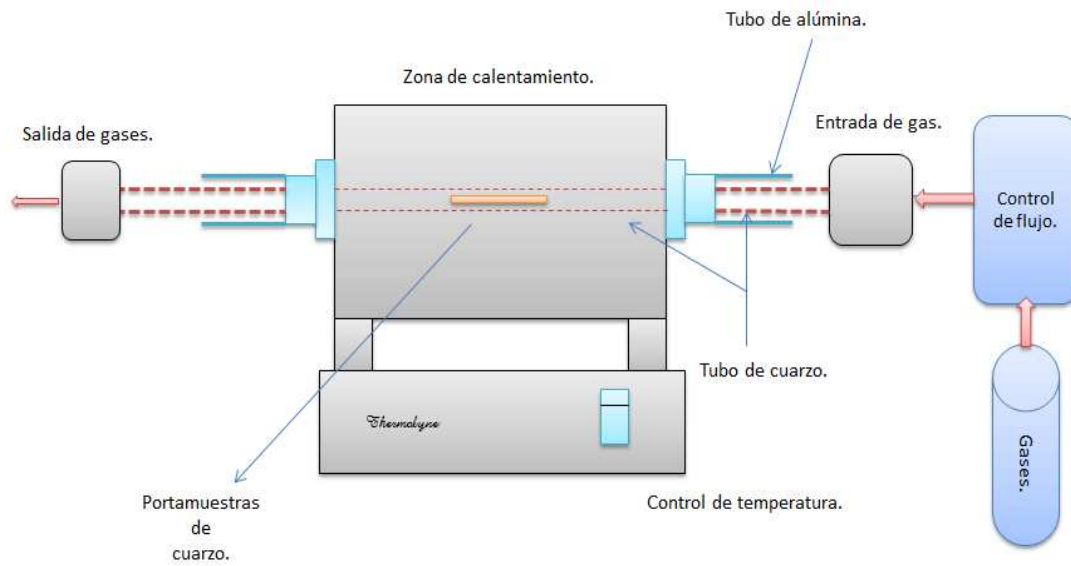


Figura 4.2.2.2. Esquema del sistema de calentamiento para tratamiento térmico.

4.3 Caracterización

4.3.1 RBS

La retrodispersión de Rutherford o RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry) es una técnica nuclear de análisis no destructiva que consiste en irradiar una muestra con iones ligeros, como protones o partículas α (He^{2+}), para después analizar la energía de los iones dispersados de la muestra como producto de colisiones elásticas de estos iones ligeros con los núcleos de los átomos de la muestra (Skoog et al., 2008).

El análisis RBS de las muestras se realizó en la cámara de análisis del Pelletron, (figura 4.3.1.1) empleando partículas α con una energía de 3 MeV. Las partículas α inciden perpendicularmente sobre la muestra y son retrodispersadas y detectadas a un ángulo de 167° respecto a la dirección del haz incidente.

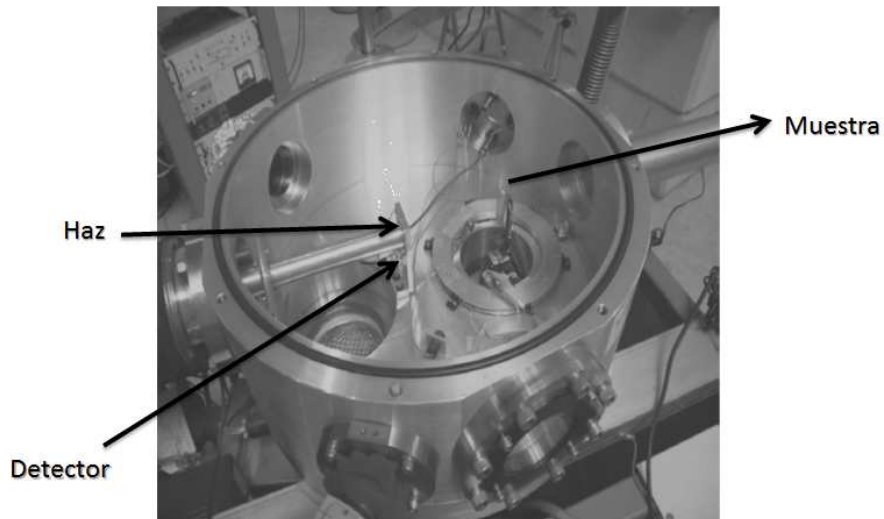


Figura 4.3.1.1. Fotografía de la cámara de análisis del acelerador Pelletron IFUNAM.

La cámara de análisis está equipada con un detector asociado a un sistema electrónico, un sistema de vacío, un colimador y un portamuestras, en el cual se puede colocar un cierto número de muestras dependiendo del tamaño de éstas.

Cuando el haz de iones que se desplaza por la línea de vacío llega a la cámara de análisis, pasa por el colimador, que reduce el área transversal del haz. Este haz colimado incide sobre la muestra produciendo que algunas partículas de ésta sean retrodispersadas. Al llegar al detector, las partículas retrodispersadas generan una cantidad de carga eléctrica proporcional a la energía de la partícula, la cual se integra y se transforma en un pulso eléctrico mediante un preamplificador. Esta señal pasa a un amplificador que produce un pulso del tipo gaussiano con una altura proporcional a la energía del ion detectado. El pulso pasa a un convertidor de señal (ADC), posteriormente a un analizador multicanal (MDA), en el cual se obtiene un histograma de la frecuencia de eventos registrados con cierta energía, mejor conocido como espectro RBS (figura 4.3.1.2).

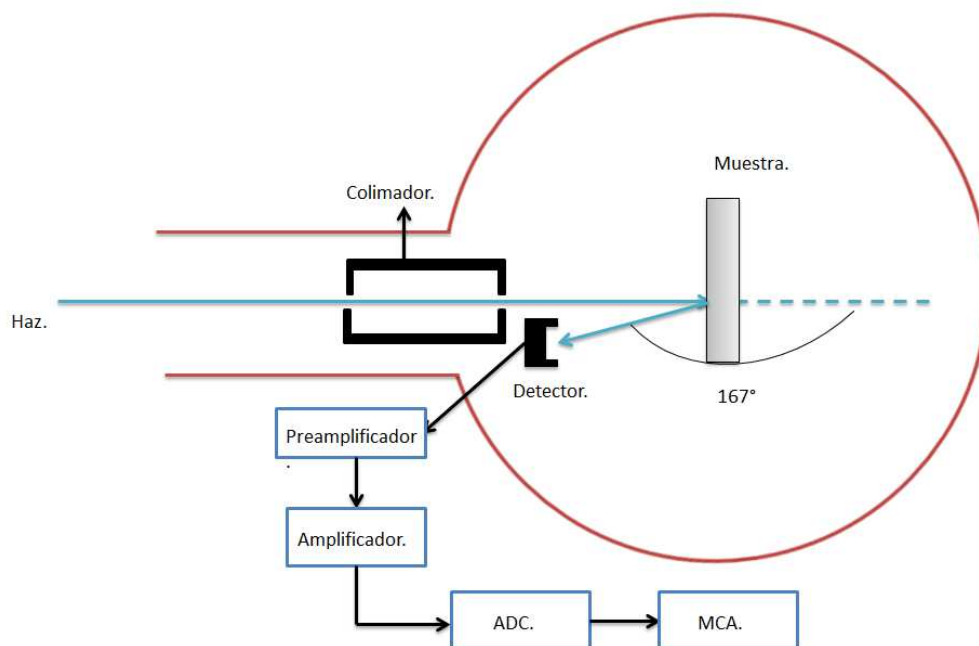


Figura 4.3.1.2. Vista esquemática de la cámara de análisis, en el experimento de RBS, del acelerador Pelletron IFUNAM.

Los espectros RBS obtenidos fueron analizados utilizando un programa de cómputo que simula la forma teórica que debe tener el espectro bajo ciertas condiciones experimentales y de composición de la muestra. A partir de la comparación del espectro experimental con el simulado (o teórico) se puede determinar la distribución de los elementos en la muestra. En este caso se utilizó el programa SIMRA para la simulación.

4.3.2 Fotoluminiscencia

La fotoluminiscencia es un fenómeno de emisión de radiación UV, visible o IR, mediante un proceso radiativo ante la absorción o excitación previa de un sistema. El sistema es excitado con luz de cierta longitud de onda y responde emitiendo luz con una longitud de onda diferente. La excitación del sistema se puede llevar a cabo mediante el uso de un láser (Ariza et al., 2003). El láser genera un haz de luz por medio de la emisión estimulada de radiación. El haz tiene como característica ser cuasi-monocromático y direccional, es decir coherente temporal y espacialmente.

Un láser consiste en una cavidad cilíndrica con extremos reflejantes, contiene un medio activo y funciona como resonador óptico. También tiene un sistema de bombeo que excita a los electrones del medio activo de tal manera que al volver a su estado base generan una radiación estimulada; el haz producido puede ser pulsado o continuo.

En este experimento se utilizó un láser de Kr-F como fuente de energía de haz pulsado con una frecuencia de 5 (Hz) y una ventana temporal de 200 (ns) y un diámetro de 2 (mm). Las mediciones de emisión se realizaron a una longitud de onda de 380, 515, 660, 795 y 930 (nm). El esquema del experimento se observa en la figura 4.3.2.1.

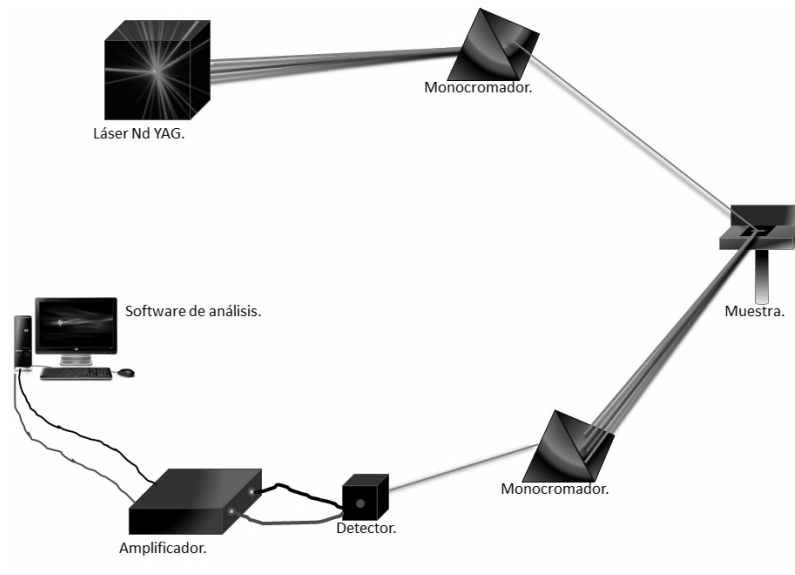


Figura 4.3.2.1. Experimento de medición de fotoluminiscencia.

La luz emitida por el láser pasa por un monocromador, el cual selecciona una longitud de onda λ_c que incide sobre la superficie de la muestra excitándola. La luz emitida por la muestra es enfocada y monocromada en una λ_0 que incide en el detector. La señal que llega al detector es amplificada y codificada, posteriormente la señal se registra y se analiza en una computadora para así obtener un espectro. Un espectro de emisión de fotoluminiscencia, como el que se muestra en la figura 4.3.2.2, proporciona información acerca de la longitud de onda de la luz emitida por la muestra al ser excitada por una longitud de onda fija λ_0 .

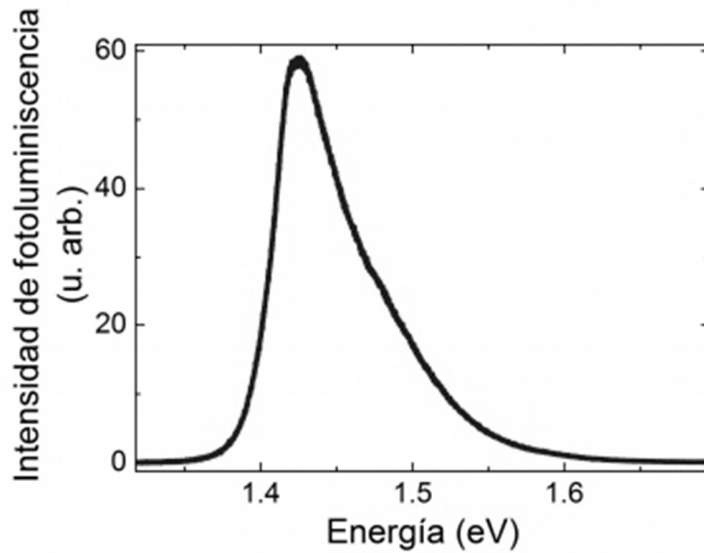


Figura 4.3.2.2. Espectro de emisión de fotoluminiscencia.

La lámpara del láser utilizada durante el experimento está calibrada para 50 horas de uso y los resultados experimentales se corrigen utilizando la respuesta espectral de esta lámpara, la cual es dada por el fabricante.

Referencias

ARIZA H., Fabricación y caracterización óptica de materiales semiconductores para aplicaciones en optoelectrónica, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.*, **27**, (104), 2003, p 357-368.

PEÑA, O., RODRÍGUEZ-FERNÁNDEZ, L., ROIZ, J., CHEANG-WONG, J.C., ARENAS-ALATORRE, J., CRESPO-SOSA, A. Y OLIVER, A., "Average size of Ag nanoclusters in silica determined by optical light absorption measurements.", *Revista Mexicana de Física*, **553**, (5), 2007, p 62-66.

PERKOWITZ, S., "Optical Characterization of Semiconductors: Infrared, Raman and Photoluminescence Spectroscopy.", Academic Press, London, 1993, p 16-32.

RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ, L., "Aceleradores de partículas: irradiación con iones y electrones", 6° Escuela Mexicana de Física Nuclear, Instituto de Física, UNAM, 2009, p 21- 38.

SKOOG, D., HOLLER, F. J. y CROUCH, S. R., "Principios de análisis instrumental.", 6° edición, México, Cengage Learning, 2008, p 603-605.

5. Resultados

5.1 Presentación de resultados

5.1.1 Simulaciones con SRIM (TRIM)

Previamente al experimento de implantación iónica se llevó a cabo su simulación utilizando el programa SRIM (*Stopping and Range of Ions in Matter*), que se basa en el código TRIM (Transport of Ions in Matter), y se utiliza para simular los efectos de la irradiación en un material. De la simulación se obtuvieron dos tipos de gráficas, una de ellas muestra la distribución de iones en el material en función de la profundidad y la otra muestra la trayectoria de los iones desde que entran en contacto con la superficie del material hasta que se detienen a una cierta profundidad dentro del material; es decir, se muestra la trayectoria y el alcance de los iones.

Para la simulación se establecieron los parámetros correspondientes para cada implantación, las cuales se muestran en las siguientes tablas:

Tabla 5.1.1. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV.

Simulación 1: Implantación de iones Si 5 MeV	
Ion	Si
Datos del sustrato	SiO ₂ (cuarzo)
Espesor de capa	50000
Densidad	2.32 [g/cm ³]
Energía	5 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°

Tabla 5.1.2. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 1 MeV.

Simulación 2: Implantación de iones Si 5 MeV y Ag 1 MeV.	
Ion	Si
Datos del sustrato	SiO ₂ (cuarzo)
Espesor de capa	50000
Densidad	2.32 [g/cm ³]
Energía	5 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°
Segunda capa.	
Ion	Ag
Energía	1 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°

Tabla 5.1.3. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 3 MeV.

Simulación 3: Implantación de iones Si 5 MeV y Ag 3 MeV.	
Ion	Si
Datos del sustrato	SiO ₂ (cuarzo)
Espesor de capa	50000
Densidad	2.32 [g/cm ³]
Energía	5 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°
Segunda capa.	
Ion	Ag
Energía	3 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°

Tabla 5.1.4. Parámetros establecidos para la simulación utilizando el programa SRIM para la implantación de iones de silicio a 5 MeV y plata a 1 y 3 MeV.

Simulación 4: Implantación de iones Si 5 MeV, Ag 1 MeV y Ag 3 MeV.	
Ion	Si
Datos del sustrato	SiO ₂ (cuarzo)
Espesor de capa	50000
Densidad	2.32 [g/cm ³]
Energía	5 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°
Segunda capa.	
Ion	Ag
Energía	3 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°
Tercera capa.	
Ion	Ag
Energía	1 [MeV]
Ángulo de incidencia	0°

Los gráficos de la trayectoria de los iones muestran que la mayoría de los iones irradiados siguen una misma trayectoria y alcance; muy pocos son desviados. Cuando los iones inciden en el sustrato con una cierta energía inicial, al penetrarlo se van frenando, debido a efectos de la interacción radiación–materia,

como el frenado electrónico y el nuclear; la energía inicial se disipa y disminuye hasta que los iones se detienen y quedan implantados dentro del material a una cierta profundidad. Ésta depende de la energía inicial de la irradiación, del ion proyectil, del ángulo de incidencia y del sustrato sobre el cual se lleva a cabo la irradiación. En las figuras obtenidas de la simulación (figuras 5.1.1 a 5.1.8) se observa que los iones de silicio irradiados a 5 MeV penetraron a una mayor profundidad en el sustrato en comparación a los iones de plata irradiados a 3 y 1 MeV. Siendo los iones de plata irradiados a 1 MeV los que quedaron implantados a menor profundidad en el material.

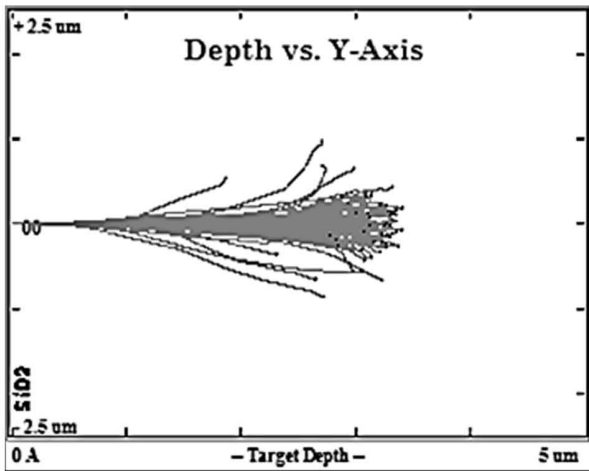


Figura 5.1.1. Trayectoria de irradiación de iones de Si en SiO₂ con una energía de 5 MeV.

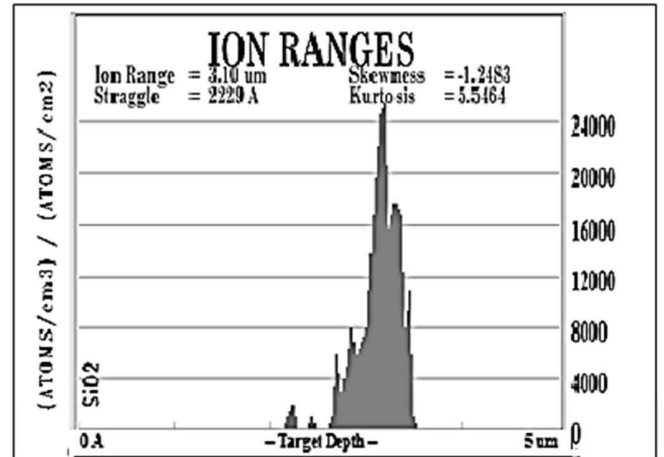


Figura 5.1.2. Distribución de iones de Si irradiados con una energía de 5 MeV en SiO₂.

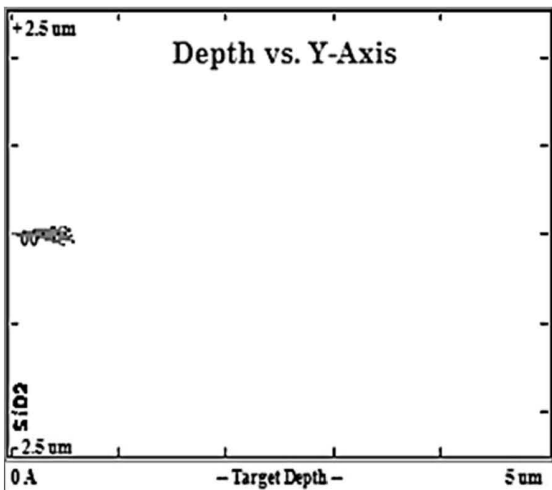


Figura 5.1.3. Trayectoria de irradiación de iones de Ag en SiO₂ con una energía de 1 MeV.

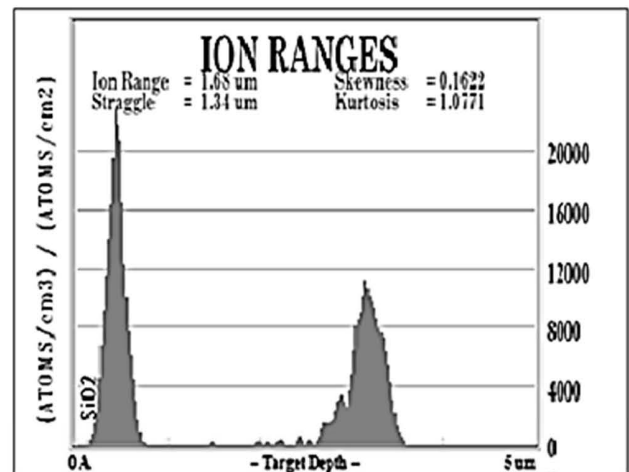


Figura 5.1.4. Distribución de iones de Ag irradiados a 1 MeV en SiO₂, previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.

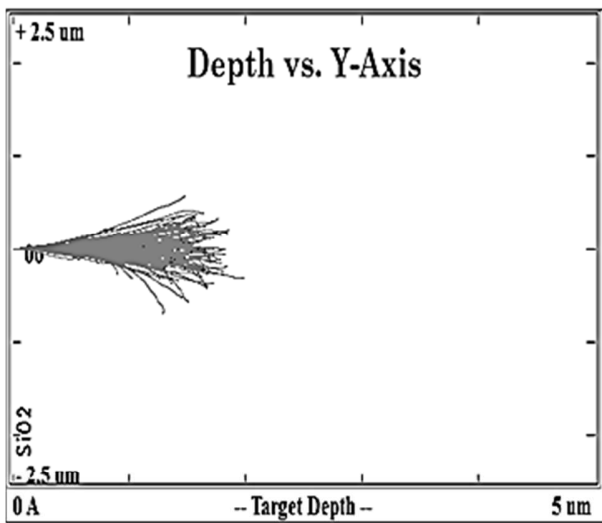


Figura 5.1.5. Trayectoria de irradiación de iones de Ag en SiO₂ con una energía de 3 MeV.

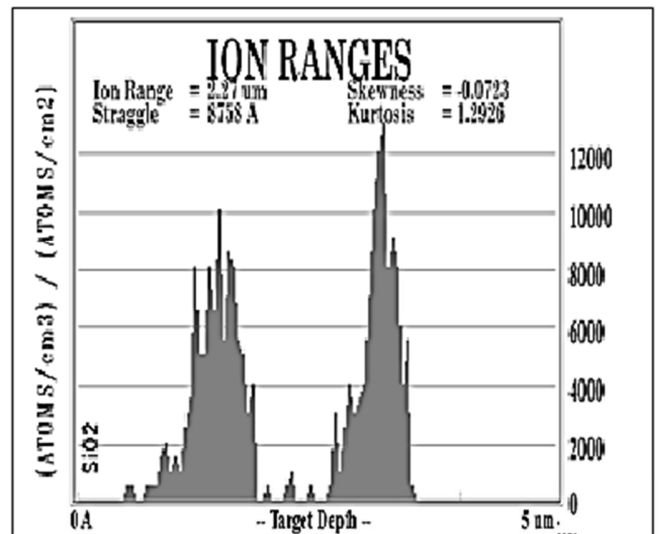


Figura 5.1.6. Distribución de iones de Ag irradiados a 3 MeV, en SiO₂ previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.

Al obtener la relación de átomos o iones irradiados por unidad de área o volumen en función de la profundidad que alcanzan en el sustrato, se obtiene la distribución de estos iones en el material. Se observa que para todos los casos de simulación, la implantación de iones sigue una distribución casi gaussiana.

La figura 5.1.6 muestra que al llevar a cabo el experimento de implantación, algunos iones de plata quedan implantados a una profundidad muy cercana a los iones de silicio. Por otro lado, la figura 5.1.4 muestra que algunos de los iones de plata irradiados a 1 MeV pueden quedar cerca de la superficie del sustrato.

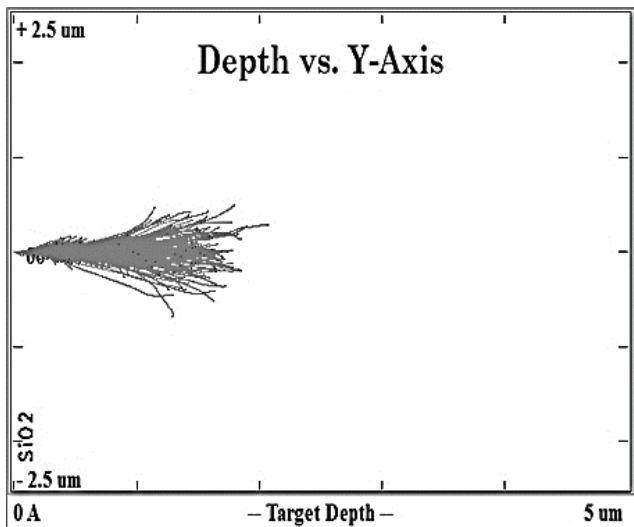


Figura 5.1.7. Trayectoria de irradiación de iones de plata en SiO_2 con una energía de 1 y 3 MeV.

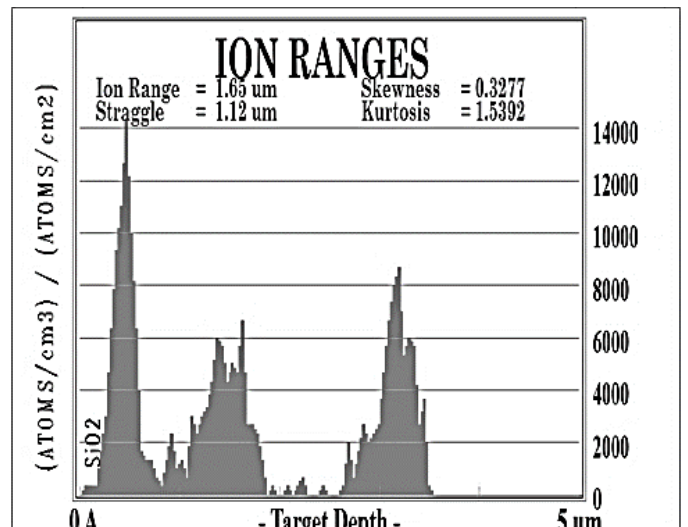


Figura 5.1.8. Distribución de iones de Ag irradiados a 1 y 3 MeV en SiO_2 , previamente irradiado con iones de Si a 5 MeV.

En la figura 5.1.8 se muestra que algunos de los iones de plata irradiados con una energía de 3 MeV estarán implantados en las proximidades de los iones de silicio. También se observa cierto traslape entre las colas de las distribuciones de plata irradiadas con energías de 1 MeV y 3 MeV.

Los gráficos de distribución de iones muestran que al utilizar una menor energía durante la irradiación, la distribución de iones se localiza a una menor profundidad; es decir, más cercana a la superficie; mientras que los iones irradiados a mayor energía, tendrán un alcance mayor en el sustrato; es decir, penetrarán más en el material.

5.1.2 Espectros RBS

Después de realizar las simulaciones SRIM, usando las condiciones experimentales que se utilizarían durante el trabajo de tesis, se llevó a cabo la implantación de iones y la formación de las nanopartículas para posteriormente realizar el análisis RBS para cada muestra, usando partículas α (He^{2+}) como proyectiles. Los espectros RBS de las muestras implantadas con iones de silicio y plata se muestran a continuación.

En todos los espectros (figuras 5.1.2.1 a 5.1.2.4) se observa un máximo a una energía de 1090 KeV, que corresponde al oxígeno. La presencia de este máximo tan pronunciado se debe a que la energía usada durante el análisis RBS corresponde a la energía de resonancia del oxígeno, lo cual provoca un aumento en la sección eficaz de Rutherford, incrementando la sensibilidad de detección de este elemento. Este comportamiento se conoce como una sección no-Rutherford. Resulta oportuno aclarar que la presencia de estas resonancias no afecta el análisis de la muestra y tampoco alteran el resultado en el perfil de concentración.

La línea punteada en color rojo en los espectros RBS que se muestran a continuación, representa los datos obtenidos experimentalmente; mientras que la línea continua azul representa el espectro simulado mediante el programa SIMNRA. El programa de simulación SIMNRA permite obtener información para realizar un perfil de concentración de los iones implantados en función de la profundidad a la cual penetraron en el material. En un espectro de RBS, los iones más ligeros aparecen a la izquierda del espectro (energías menores), mientras que los más pesados se corren hacia la derecha (energías mayores). Esto se debe a que las partículas α pierden más energía al interactuar con partículas ligeras que con las pesadas.

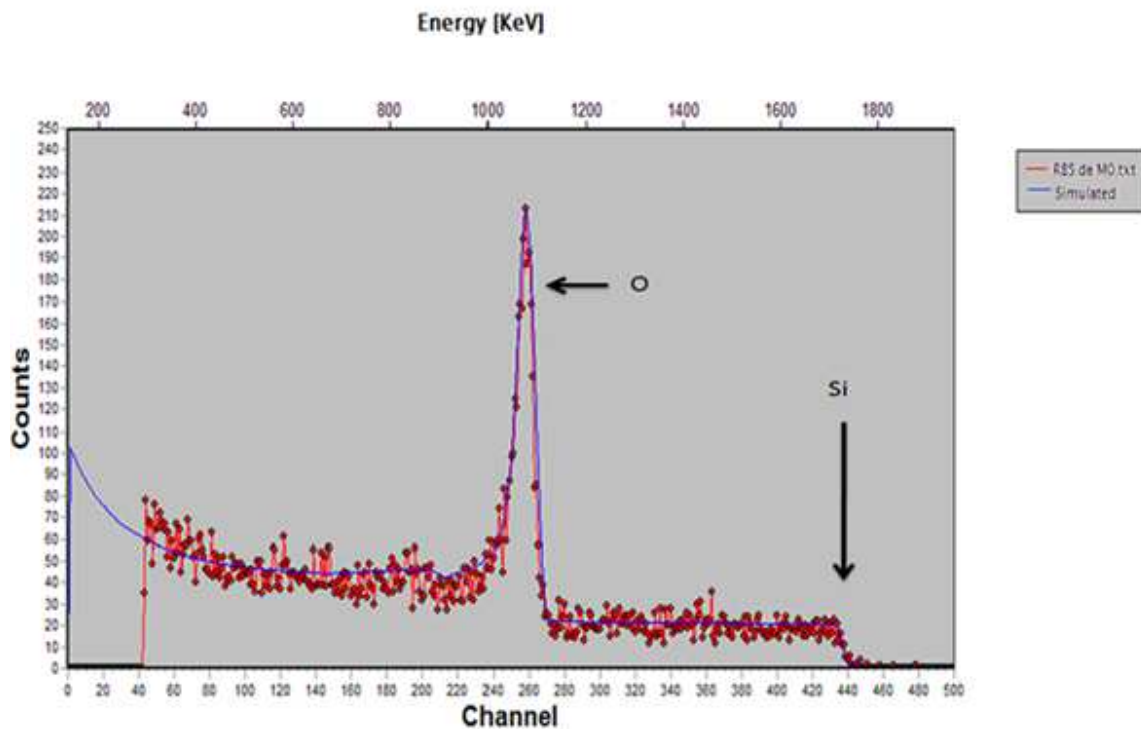


Figura 5.1.2.1. Espectro RBS para un sustrato de SiO₂ implantado con iones de Si a 5 MeV.

La figura 5.1.2.1 corresponde a la muestra implantada solamente con iones de silicio a 5 MeV y es considerada como el blanco o referencia. En él se puede observar la resonancia del oxígeno y el escalón perteneciente al silicio. La composición de silicio y oxígeno en la muestra es de 33% y 67% respectivamente.

A partir de este espectro se simularon los espectros obtenidos de las demás muestras implantadas con plata (figuras 5.1.2.2 a 5.1.2.4). En el espectro de la figura 5.1.2.2, correspondiente a la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV se observan los elementos del blanco a la izquierda y a la derecha un máximo perteneciente a la retrodispersión de las partículas α por los iones de plata implantados en la muestra.

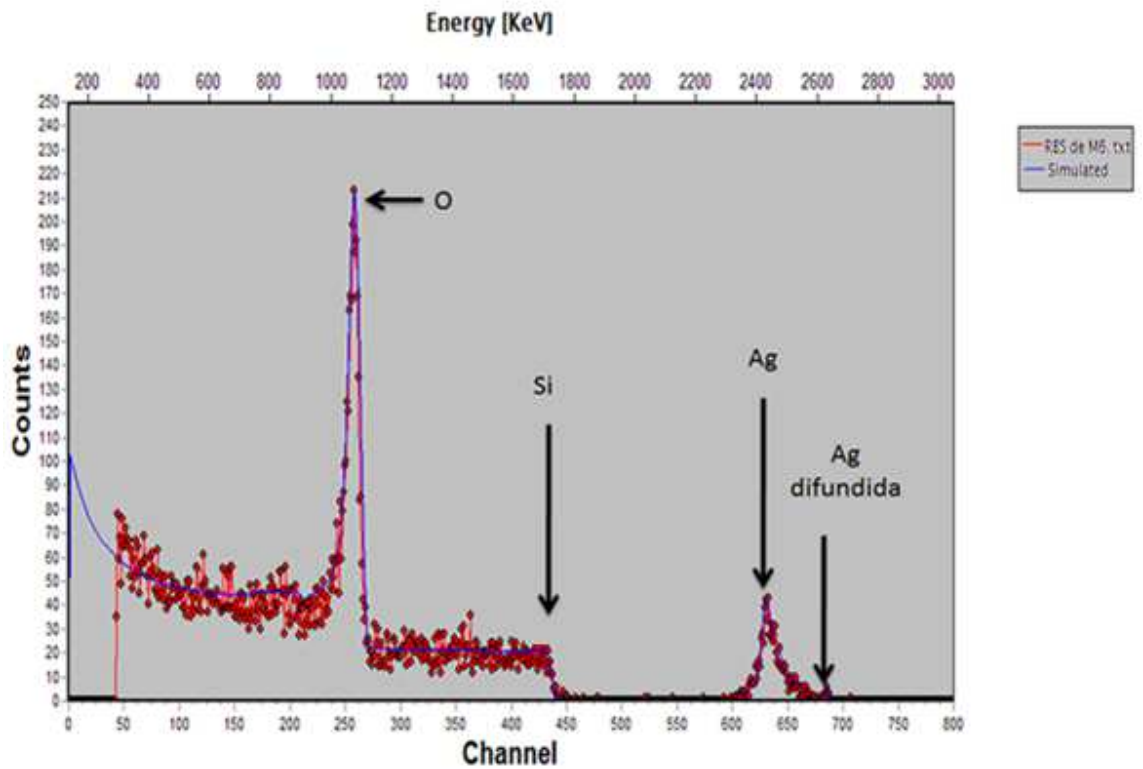


Figura 5.1.2.2. Espectro RBS para un sustrato de SiO₂ implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 1 MeV.

Como se observó en la simulación SRIM (figuras 5.1.3 y 5.1.4), algunos iones de plata quedaron implantados muy cerca de la superficie de la muestra, por lo que en el espectro de RBS (figura 5.1.2.2) se observa un pico más pequeño a la derecha, el cual corresponde a la plata implantada en la superficie; así, el pico más grande se asocia a la implantación en el interior del sustrato. La presencia de plata superficial también puede deberse a un fenómeno de difusión térmica ocurrido durante el tratamiento térmico.

En el espectro obtenido para la muestra irradiada con iones de plata a 3 MeV (figura 5.1.2.3) se observa que una cierta cantidad de iones de plata están muy cercanos a la señal del silicio, como ya se había previsto en la simulación.

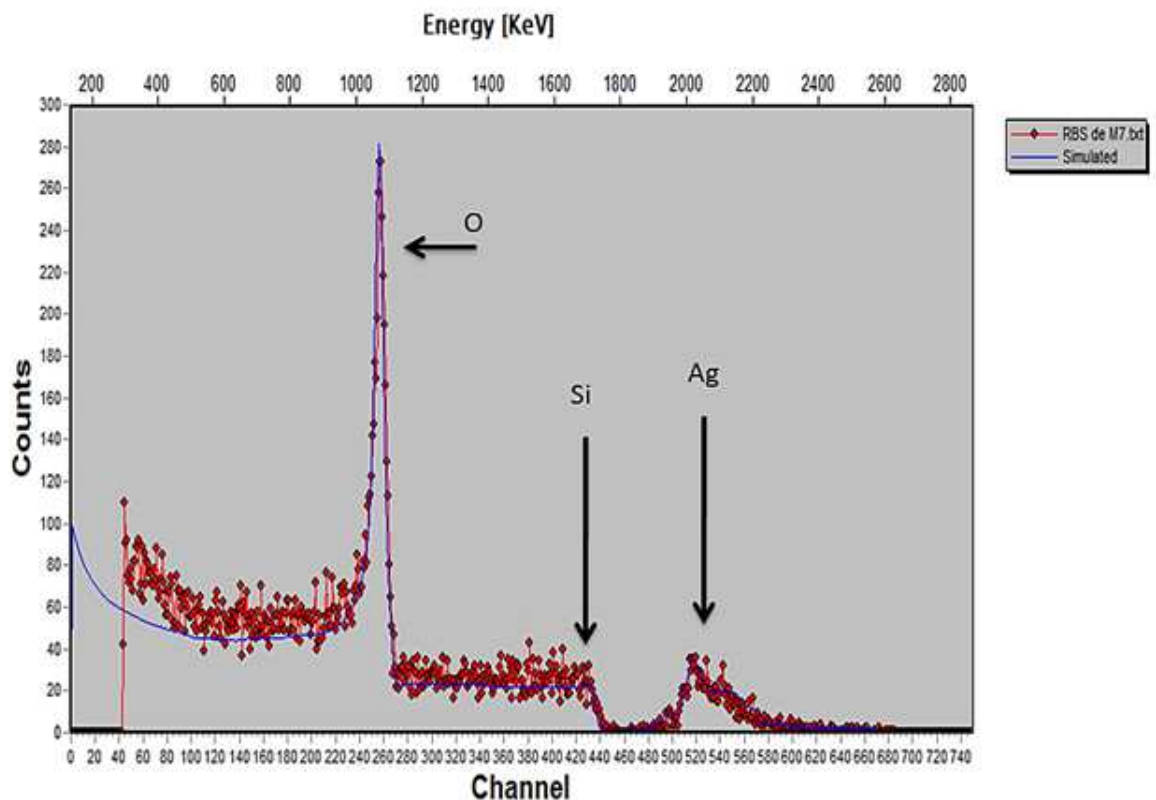


Figura 5.1.2.3. Espectro RBS para un sustrato de SiO_2 implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 3 MeV.

Como la energía de implantación fue mayor para el caso de la figura 5.1.2.3, la distribución de la plata abarca un rango mayor en comparación con la mostrada en la figura 5.1.2.2, por lo que el máximo se presenta de una forma menos definida y con menor intensidad.

Para el caso de la implantación de iones de plata a dos diferentes energías en una misma muestra, se obtuvo un espectro RBS en el cual se observa que los iones de plata implantados a una energía de 3 MeV se encuentran más a la izquierda que los iones de plata implantados a 1 MeV (figura 5.1.2.4).

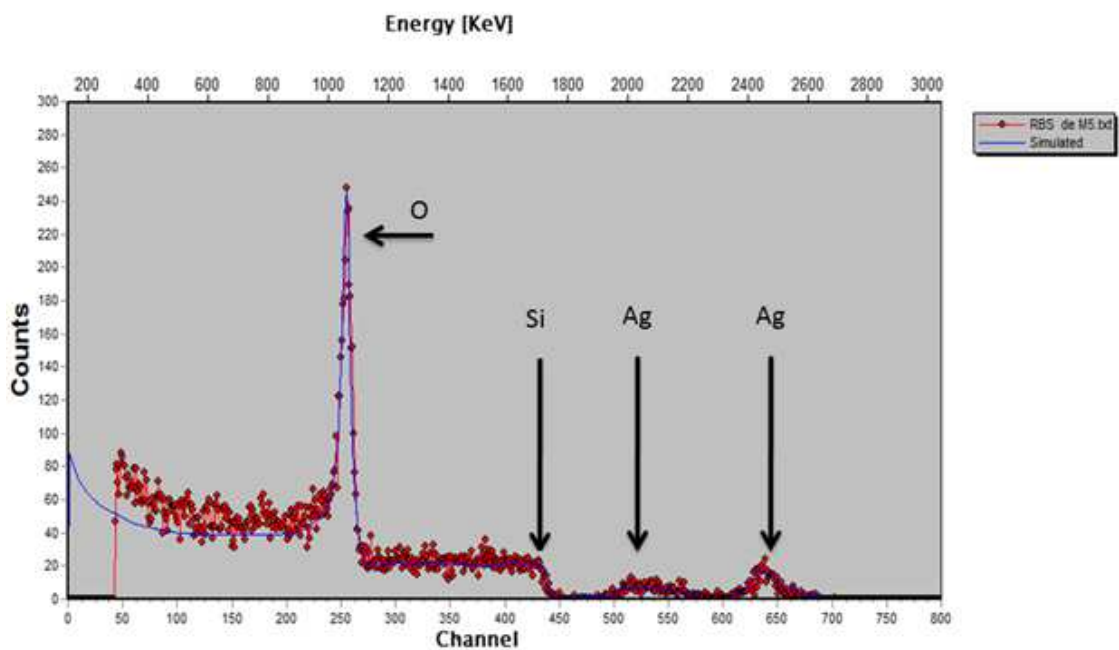
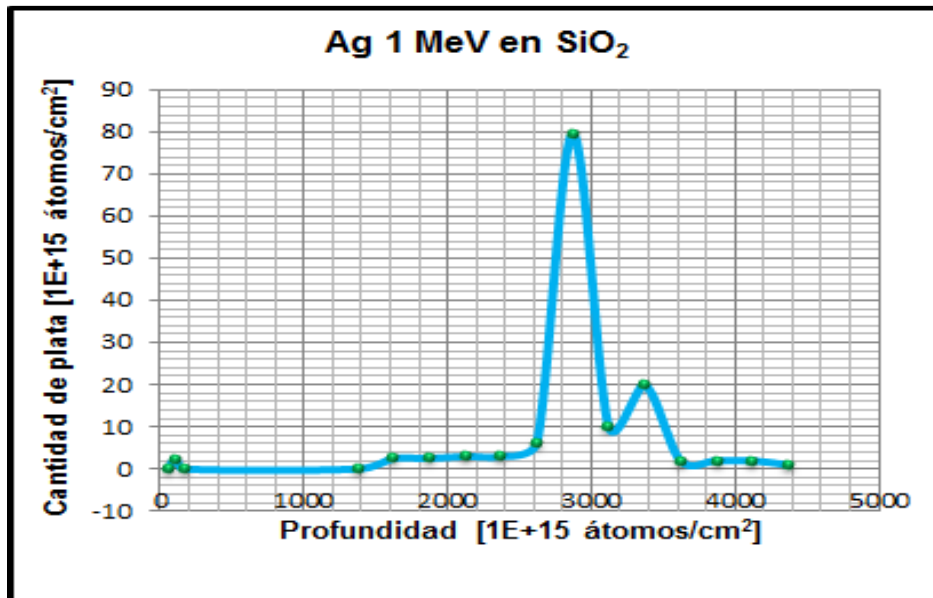


Figura 5.1.2.4. Espectro RBS para un sustrato de SiO_2 implantado con iones de Si a 5 MeV e iones de Ag a 1 y 3 MeV.

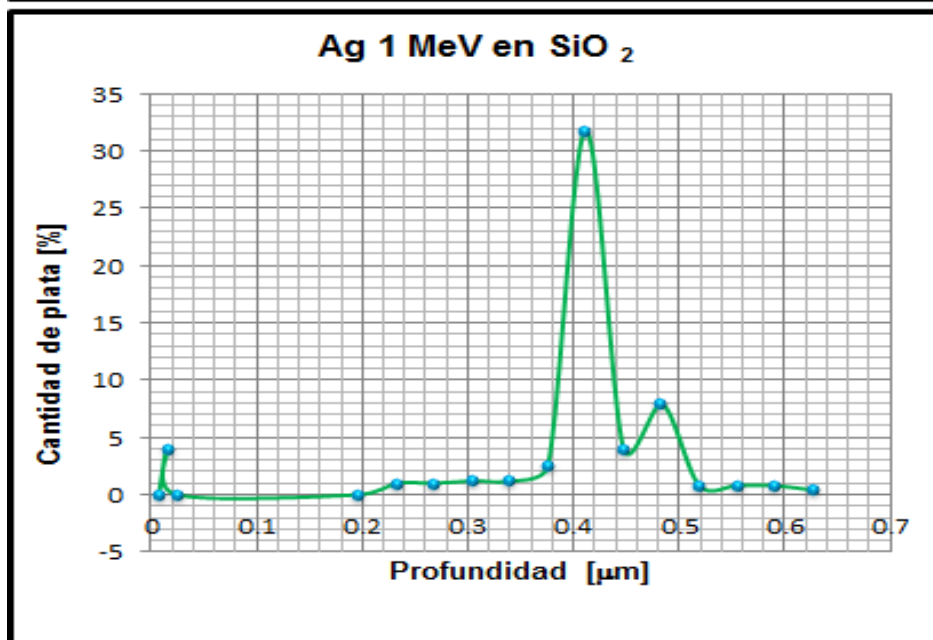
Los iones de plata implantados a 3 MeV presentan una distribución en un rango mayor que los implantados a 1 MeV, por lo que el máximo de iones de plata implantados en la muestra con una energía de 1 MeV tiene mayor definición en comparación con la señal que se observa para los iones implantados con una

energía de 3 MeV. En este espectro también se observa la difusión de iones de plata hacia la superficie de la muestra.

Mediante la simulación de los espectros RBS utilizando el programa SIMNRA se pudo obtener un perfil de concentración de los iones de plata en función de la profundidad a la cual quedaron implantados. Los perfiles de concentración para cada una de las muestras implantadas con iones de plata se muestran a continuación en dos tipos de gráficos. La figura 5.1.2.5(a) presenta la relación de la cantidad de átomos de plata implantados por unidad de área en función de la profundidad de implantación de los iones en capas atómicas. Una capa atómica se considera como 1×10^{15} átomos/cm². La figura 5.1.2.5 (b) muestra el porcentaje atómico de concentración de plata en función de la profundidad de la implantación en micras.



(a)



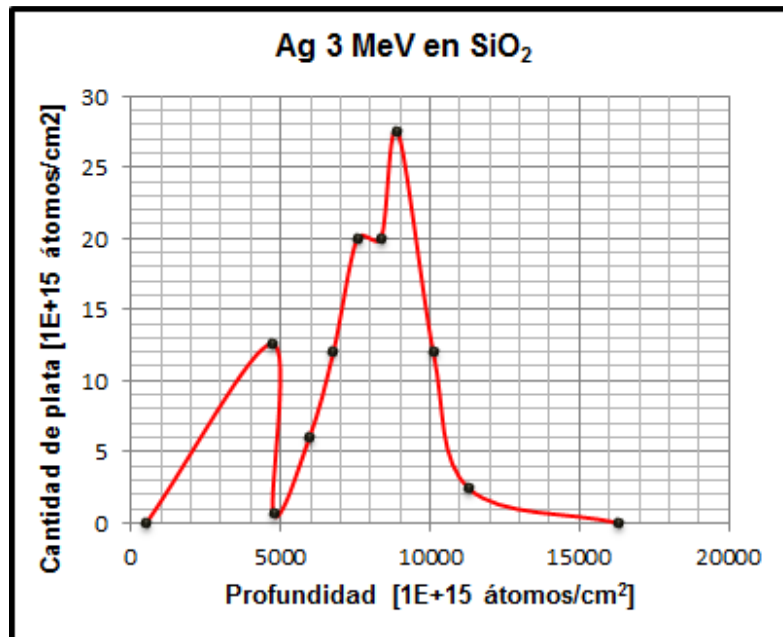
(b)

Figura 5.1.2.5. Distribución de átomos de plata implantados a 1 MeV en función de la profundidad de implantación en dióxido de silicio en (a) capas atómicas, y (b) micras.

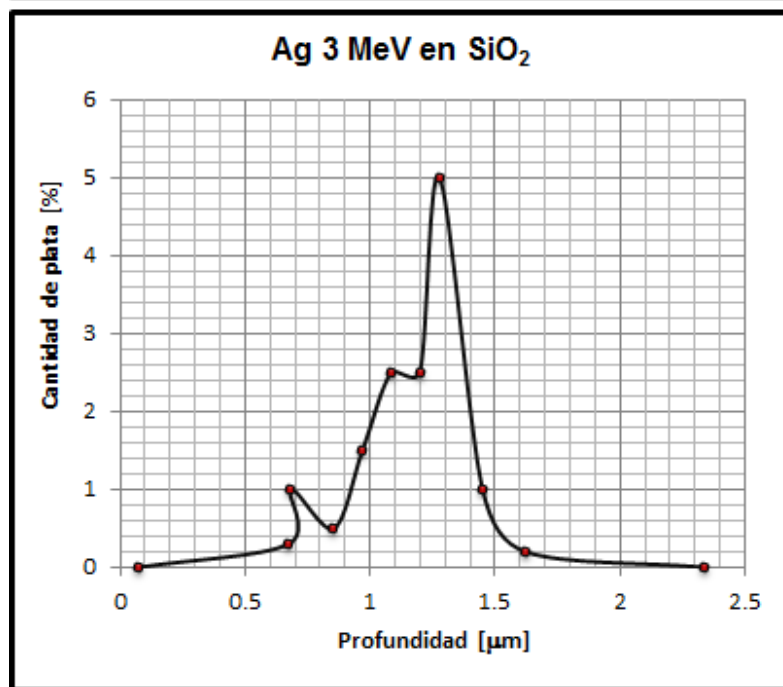
La figura 5.1.2.5 muestra la cantidad de átomos implantados a 1 MeV a diferente profundidad del sustrato de dióxido de silicio en capas atómicas y en micras.

Se observa que aproximadamente a una profundidad de 2700 capas atómicas, (figura 5.1.2.5 (a)), lo que corresponde a 0.4 μm en la figura 5.1.2.5 (b), se encuentra la mayor cantidad de átomos de plata implantados a 1 MeV, con una concentración de 80 átomos/ cm^2 , lo que corresponde a un porcentaje de 32%, de un total de 136.5×10^{15} átomos/ cm^2 implantados. Se observa un máximo relativo de concentración a una profundidad de 3300 capas atómicas ó 0.47 μm , con una concentración de átomos de plata de 20×10^{15} átomos/ cm^2 ; es decir, un 0.8%. Muy cerca de la superficie de la muestra aparece otro pico de concentración de plata de aproximadamente 0.5%, lo cual indica la existencia de átomos de plata en la superficie, debido a un fenómeno de difusión térmica. Este comportamiento se había previsto con la simulación utilizando el programa SRIM, coincidiendo con los resultados obtenidos con la técnica RBS y mostrados en el espectro RBS. También se observa que el daño a la estructura cristalina del sustrato comienza en 1200 capas atómica ó 0.2 μm , antes de llegar a la profundidad en la cual la concentración de plata alcanza su máximo.

La figura 5.1.2.6 muestra el perfil de concentración en función de la profundidad de la muestra implantada con iones de plata a 3 MeV. En ella se observa la distribución de átomos en un rango más amplio, en comparación con la distribución observada para la plata implantada a 1 MeV, coincidiendo con los resultados de la simulación.



(a)

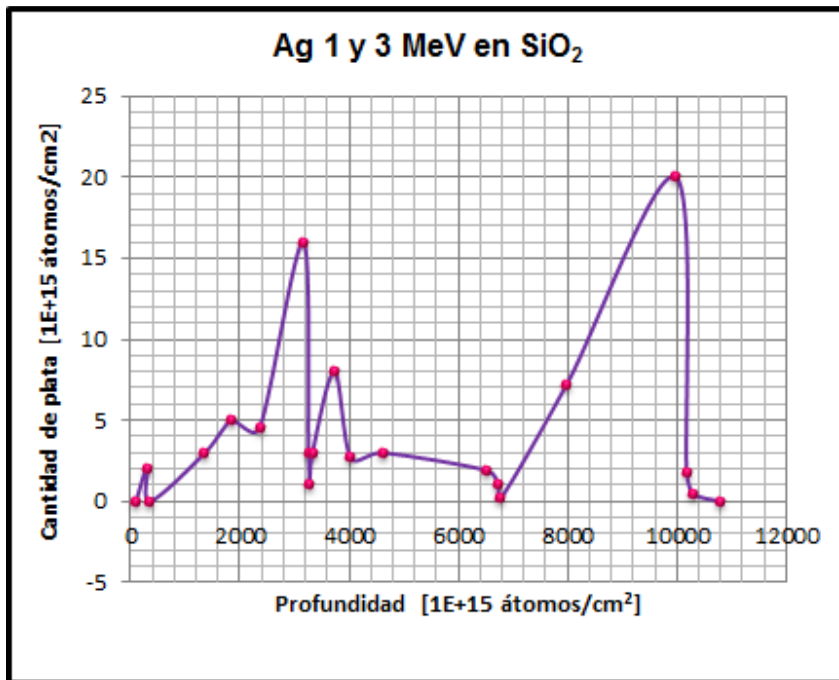


(b)

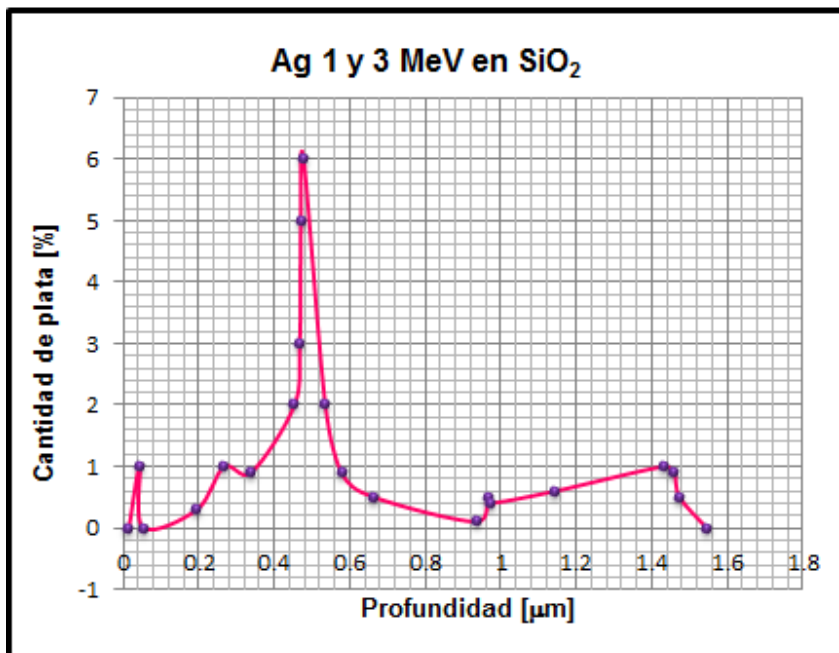
Figura 5.1.2.6. Distribución de los átomos de plata implantados a 3 MeV en función de la profundidad de implantación en un sustrato de dióxido de silicio en (a) capas atómicas, y (b) micras.

Se observa que los átomos de plata se distribuyen en un intervalo entre 500 y 1200 capas atómicas (figura 5.1.2.6 (a)), lo que corresponde a una distancia entre 0.7 y 1.5 μm de profundidad en el sustrato (figura 5.1.2.6 (b)), presentando un máximo de concentración en 900 capas atómicas ó 1.25 μm , con un total de 28×10^{15} átomos/ cm^2 y 5%, respectivamente.

La profundidad de la implantación de los iones de plata a 3 MeV (figura 5.1.2.6), es mayor a la de los iones implantados a 1 MeV (figura 5.1.2.5.), ya que a mayor energía de implantación, los iones irradiados recorren mayor distancia dentro del sustrato hasta perder su energía y quedar implantados en su interior. Se observa que el daño ocasionado por los iones irradiados en el sustrato comienza a una profundidad de 200 capas atómicas ó 0.7 μm . Este comportamiento también coincide con la simulación realizada con el programa SRIM.



(a)



(b)

La figura 5.1.2.7 muestra la concentración en función de la profundidad del sustrato en la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV. En la figura 5.1.2.7 (a) se observa que la concentración de plata comienza a ser apreciable a partir de una región cercana a la superficie. Se tienen máximos relativos en 2,900 y 3,400 capas atómicas. Las concentraciones de plata en estos dos picos son de 16×10^{15} y 8×10^{15} átomos/cm², respectivamente, y corresponden a los átomos implantados con una energía de 1 MeV. A partir de una profundidad de 4000 capas y hasta 6000 capas atómicas, se observa una densidad de átomos de plata casi constante, de 3×10^{15} átomos/cm². Al comparar esta figura con la simulación de SRIM usando las mismas condiciones experimentales, se observa que esta zona corresponde al traslape de las colas de las distribuciones de ambas implantaciones de plata. A profundidades mayores se observa un incremento en la densidad de átomos entre las 6800 y 10100 capas atómicas, alcanzando un máximo absoluto a una profundidad de 10000 capas con 20×10^{15} átomos/cm², lo cual corresponde a los átomos de plata implantados con una energía de 3 MeV.

El daño ocasionado a la estructura cristalina del sustrato prácticamente comienza desde la superficie hasta una profundidad de 10100 capas, lo que corresponde a 1.45 μm de la figura 5.1.2.7 (b). Esta figura muestra el porcentaje de átomos de plata en función de la profundidad (en micras) de los átomos de plata.

Los máximos de concentración correspondientes a las implantaciones de plata en muestras diferentes a 1 y 3 MeV (figuras 5.1.2.5 y 5.1.2.6), no coinciden con los máximos de concentración mostrados en la figura 5.1.2.7, en donde se implantaron iones de plata a 1 y 3 MeV en la misma muestra. Estos últimos máximos se encuentran desplazados a mayor profundidad del sustrato. Para el caso de la plata implantada a 1 MeV, el máximo de concentración pasó de 0.41 μm , (figura 5.1.2.5); a 0.45 μm (figura 5.1.2.7). Por otro lado, el máximo de concentración de átomos de plata implantados a 3 MeV pasó de una profundidad de 1.3 μm , (figura 5.1.2.6) a 1.47 μm (figura 5.1.2.7). Este comportamiento puede deberse a que la

muestra implantada a 2 energías diferentes, fue sometida a dos tratamientos térmicos, mientras que las muestras implantadas a una energía, sólo fueron tratadas térmicamente una vez después de ser implantada la plata. Es posible que el segundo tratamiento térmico de la muestra implantada con plata difundiera a este elemento dentro del sustrato, desplazando las mayores concentraciones de plata a diferentes profundidades dentro de la sílice.

5.1.3 Fotoluminiscencia

Con el objetivo de medir la fotoluminiscencia de las muestras implantadas con iones de plata, se realizaron mediciones de la respuesta óptica de los materiales, utilizando un láser de kriptón-flúor (Kr-F) de pulsos, barriendo el espectro en diferentes longitudes de onda (380, 515, 660, 795 y 930 nm). Al final se obtuvo la relación de la respuesta óptica en función de la longitud de onda para cada muestra. Los resultados se muestran a continuación en forma gráfica, tomando en cuenta que todas las mediciones se realizaron bajo las mismas condiciones experimentales. La figura 5.1.3.1 presenta la respuesta óptica del blanco, el cual sólo contiene iones de silicio implantados a 5 MeV en dióxido de silicio. La respuesta óptica del blanco aumenta al incrementar la longitud de onda hasta llegar a un valor máximo en una longitud de onda de 450 nm. Después disminuye y se mantiene constante hasta una longitud de onda de 1000 nm.

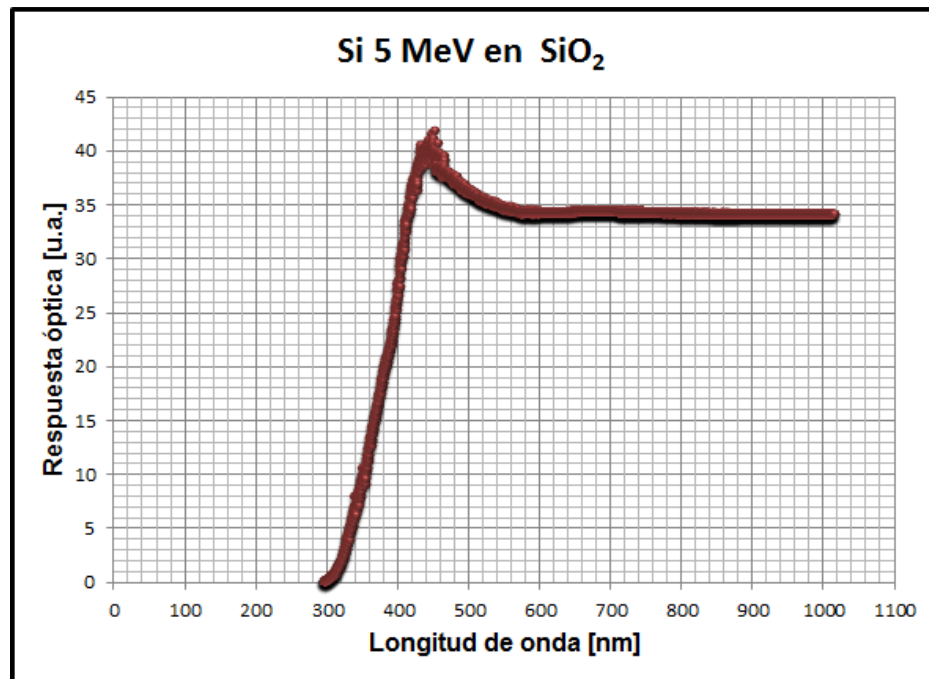


Figura 5.1.3.1. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) del blanco en función de la longitud de onda en nanómetros. La señal corresponde a la muestra con silicio implantado a 5 MeV en dióxido de silicio.

El comportamiento de la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV se presenta en la figura 5.1.3.2, en la cual se observa un incremento considerable de la respuesta óptica a partir de un valor de longitud de onda de 400 nm, presentando un máximo en 450nm con un valor de 0.8 unidades de intensidad de respuesta; posteriormente la respuesta óptica comienza a decrecer hasta una longitud de onda de 550 nm, a partir de la cual permanece constante.

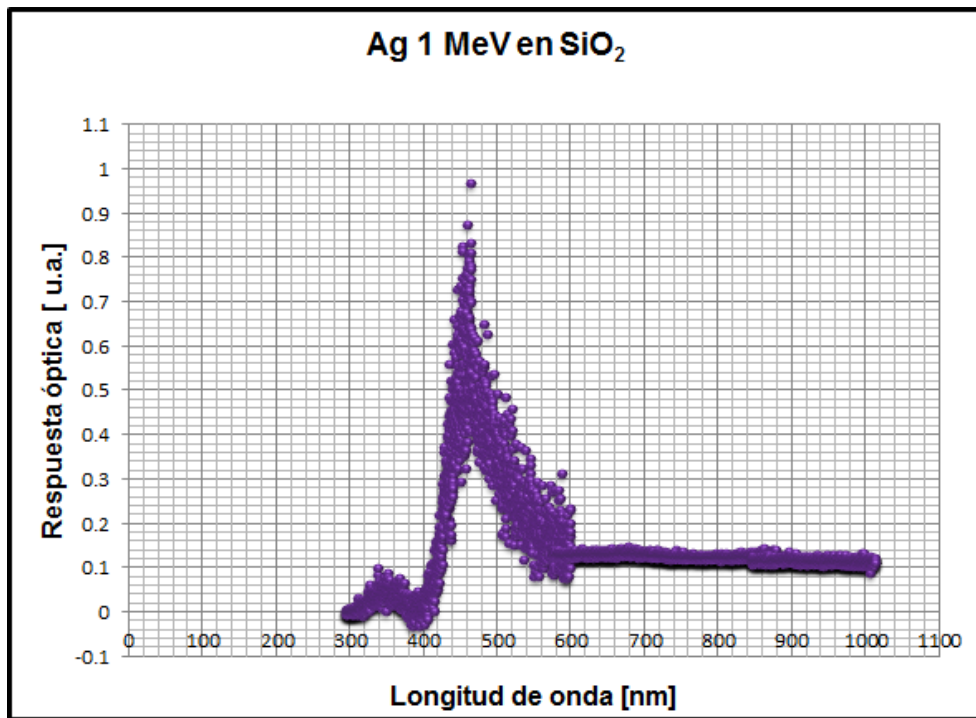
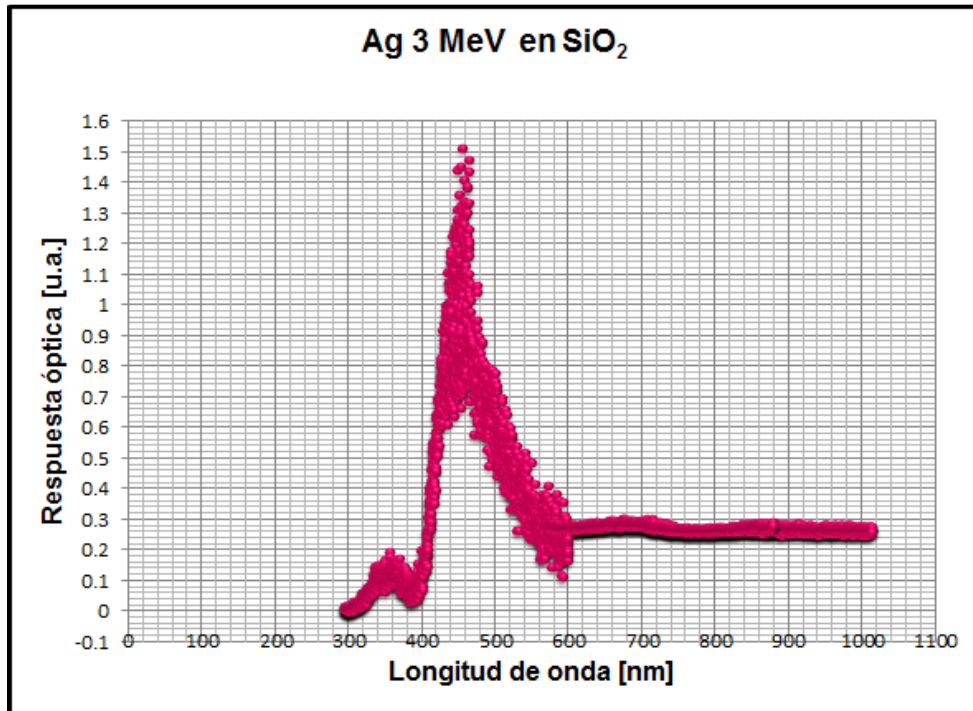


Figura 5.1.3.2. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) de la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV en función de la longitud de onda en nanómetros.

Tanto el blanco (figura 5.1.3.1) como la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV presentan un máximo de respuesta óptica en 450 nm.

La respuesta óptica en función de la longitud de onda para la muestra implantada con iones de plata a 3 MeV se presenta en la figura 5.1.3.3; en donde el incremento de la respuesta óptica comienza a observarse a una longitud de onda de 400 nm, presentando un máximo en 450 nm y alcanzando un valor de 1.3

unidades de intensidad de respuesta. A partir del máximo se observa un decremento en la respuesta óptica hasta llegar a una longitud de onda de 550nm, después de la cual permanece constante hasta los 1000 nm.



Para la muestra implantada con plata a 1 MeV (figura 5.1.3.2) el máximo de la respuesta óptica coincide con el de la muestra implantada con plata a 3 MeV (figura 5.1.3.3) en 450 nm; sin embargo, la primera señal (figura 5.1.3.2) tiene menor intensidad de respuesta, 0.8 unidades, en comparación con la segunda (figura 5.1.3.3), con 1.3 unidades.

La respuesta óptica en función de la longitud de onda para la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV se muestra en la figura 5.1.3.4.

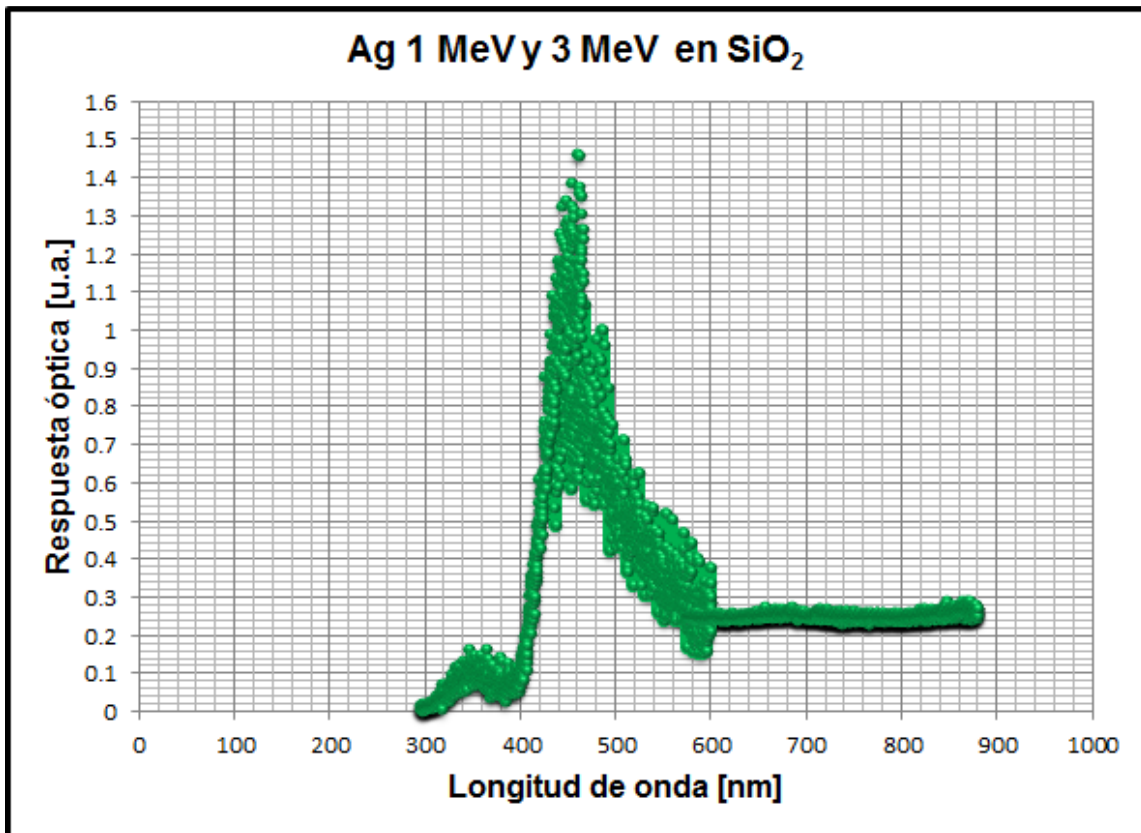


Figura 5.1.3.4. Respuesta óptica (fotoluminiscencia) de la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV en función de la longitud de onda en nanómetros.

De la figura 5.1.3.4 se observa que el máximo de respuesta óptica se encuentra en 450 nm con 1.3 unidades de intensidad de respuesta, la cual decrece; manteniéndose constante a partir de los 550 nm.

El máximo de respuesta óptica coincide con los máximos observados para las muestras implantadas con iones de plata a 1 MeV (figura 5.1.3.2) y a 3 MeV (figura 5.1.3.3) en 450 nm. La intensidad de respuesta óptica que presenta la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV (figura 5.1.3.4) es mayor a la que presenta la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV (figura 5.1.3.2) y es

igual a la que presenta la muestra implantada con iones de plata a 3 MeV (figura 5.1.3.3).

El aumento de la respuesta óptica para el sistema de plata con iones de plata implantados a 3 MeV y el sistema en el cual la implantación de iones de plata se llevó a cabo a dos diferentes energías, (1 y 3 MeV), puede ser el resultado de un fenómeno de resonancia de plasmón de superficie, el cual se debe a la interacción de los electrones de la banda de conducción de las nanopartículas con un campo electromagnético externo. Las nanopartículas regularmente espaciadas conducen la luz a través de distancias nanométricas, las cuales son mucho menores a la longitud de onda de la luz. Cuando la luz incide en la primera nanopartícula, sus plasmones de superficie comienzan a resonar haciendo resonar a otros, lo cual provoca que la luz se transmita a lo largo de distancias nanométricas. Como las nanopartículas de plata formadas dentro del material se encontraban a menor distancia de las nanopartículas de silicio, en comparación con las partículas de plata implantadas a 1 MeV, se favoreció este fenómeno trayendo como consecuencia el aumento en la respuesta óptica para las muestras.

6. Conclusiones

En este trabajo se llevó a cabo la formación de nanopartículas de silicio y plata dentro de una placa de dióxido de silicio, material semiconductor, mediante el método de implantación iónica.

La energía y ángulo de implantación así como la masa del ion implantado determinan la profundidad a la cual quedará dentro de un material. En el caso de este trabajo se observó que los iones de plata irradiados a 3 MeV quedaron implantados dentro del dióxido de silicio a mayor profundidad que los iones irradiados a 1 MeV.

Con ayuda del programa SRIM se llevó a cabo una simulación previa al experimento de implantación. Los resultados de esta simulación mostraron que los iones de silicio irradiados a 5 MeV sobre el material se implantarían a una profundidad aproximadamente de 3.5 μm dentro el material, mientras que la mayor parte de los iones de plata irradiados a 1 MeV se implantarían más cerca de la superficie (a 0.5 μm); mientras que los iones irradiados a 3 MeV se ubicarían a una profundidad cercana a 1.5 μm . Para la muestra irradiada con iones de plata a 1 y 3 MeV la simulación mostró que habría un máximo de iones implantados a una profundidad aproximada de 0.5 μm .

El análisis de los materiales mediante la técnica nuclear Retrodispersión de Rutherford (RBS) mostró que para la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV el máximo de concentración de iones, 32%, se encuentra a una profundidad de 0.4 μm dentro del material, mientras que para la muestra implantada con iones de plata a 3 MeV el máximo se encuentra a una profundidad de 1.25 μm con una concentración de 5%. Para la muestra implantada con iones de plata a 1 y 3 MeV se observó un máximo de concentración de iones de plata del 6% a una profundidad del 0.4 μm .

Al medir la respuesta óptica para cada muestra se encontró que la muestra con iones de plata implantados a 3 MeV presentó una mayor fotoluminiscencia en comparación con la muestra implantada a 1 MeV. Cuando se llevó a cabo la formación de nanopartículas de silicio dentro del material semiconductor, éstas quedaron a una profundidad aproximada de 3.5 μm . Al implantar plata a 3 MeV se formaron nanopartículas de plata dentro del material a una profundidad aproximada de 1.5 μm , más cercana a las nanopartículas de silicio, en comparación con las formadas con plata implantada a 1 MeV, lo que generó un fenómeno de resonancia de plasmón de superficie y, por lo tanto, el aumento de la respuesta óptica de la muestra. Para la muestra implantada sólo con iones de plata a 1 y 3 MeV se observó un aumento de la fotoluminiscencia en comparación con la muestra implantada con iones de plata a 1 MeV, lo cual pudo deberse a la presencia de las partículas de plata implantadas a 3 MeV en la muestra. Como se observó en la simulación y en el análisis por RBS, hubo una gran cantidad de iones de plata (nanopartículas) que quedaron implantadas muy cerca de la superficie a 0.5 μm y otros tantos quedaron implantados a una profundidad de 1.5 μm . La cercanía de estos iones con las nanopartículas de silicio favoreció la resonancia del plasmón de superficie, lo cual se ve reflejado en un incremento en la respuesta óptica de este sistema. Sin embargo, los resultados mostrados en este trabajo no son concluyentes, por lo que se sugiere realizar más muestras para formar otros sistemas y estudiar su respuesta óptica.

Se propone estudiar más adelante el factor del recocido de las muestras en función de su respuesta fotoluminiscente.

Apéndice 1

En este apéndice se muestra con detalle cómo se efectuaron las simulaciones con el programa SRIM (TRIM). Esto se hizo con el fin de obtener una aproximación teórica de la profundidad a la cual los iones serían implantados dentro del material.

Al abrir el programa y ejecutar la opción TRIM Calculations, aparece una ventana como la que se muestra en la figura A1.1; en la cual se seleccionan las condiciones para llevar a cabo la simulación de acuerdo a los parámetros experimentales.



Figura A1.1. Ventana de inicio del programa SRIM (TRIM) en donde se establecen las condiciones para la simulación.

Para las simulaciones utilizadas en este trabajo los parámetros que se manipularon fueron los siguientes: el ion a implantar, la energía de implantación, el ángulo de incidencia, el material en el cual se implantan los iones, la capa en la que se implantan los iones y su espesor. La simulación se llevó a cabo de la siguiente manera:

Primero se seleccionó el ion a implantar, en la opción *ion data* se seleccionó silicio. Después se escribió la energía de implantación, para este caso fueron 5000 KeV; y el ángulo de incidencia que fue de 0°.

Establecidos estos parámetros se seleccionó el material en el que se implantarían los iones. En la sección *Target data* se selecciona el botón *Compound dictionary*; ahí aparece una ventana en donde se selecciona la opción *Common Compounds*, se despliega un menú con varios materiales y se selecciona *SiO₂ quartz* y se da click en la opción *Add to current layer*. Habiendo seleccionado el material en el cual se implantarán los iones, se establece el espesor de la capa de iones, que en este caso fue de 50000. Los parámetros ya establecidos para llevar a cabo la simulación se muestran en la figura A1.2, en la cual se observa el tipo de ion a implantar, la energía de implantación, el material en el cual se implantan los iones y el espesor de la capa de iones implantados en el material. Para que la simulación empiece, se da click en el botón *Save input and Run TRIM* (figura A1.2).



Figura A1.2. Ventana de inicio del programa SRIM (TRIM) con las condiciones establecidas para la simulación.

Al seleccionar la opción *Save input and Run TRIM* (figura A1.2) se abre una nueva ventana en la cual aparece el avance de la simulación, así como una gráfica que muestra el alcance y la trayectoria de los iones implantados (figura A1.3). En la parte inferior izquierda de la pantalla se encuentra la sección *PLOT Window*, al seleccionar la opción *Ion Distribution* aparecerá en otra ventana el gráfico que muestra la distribución de iones en función de la profundidad (figura A1.4).

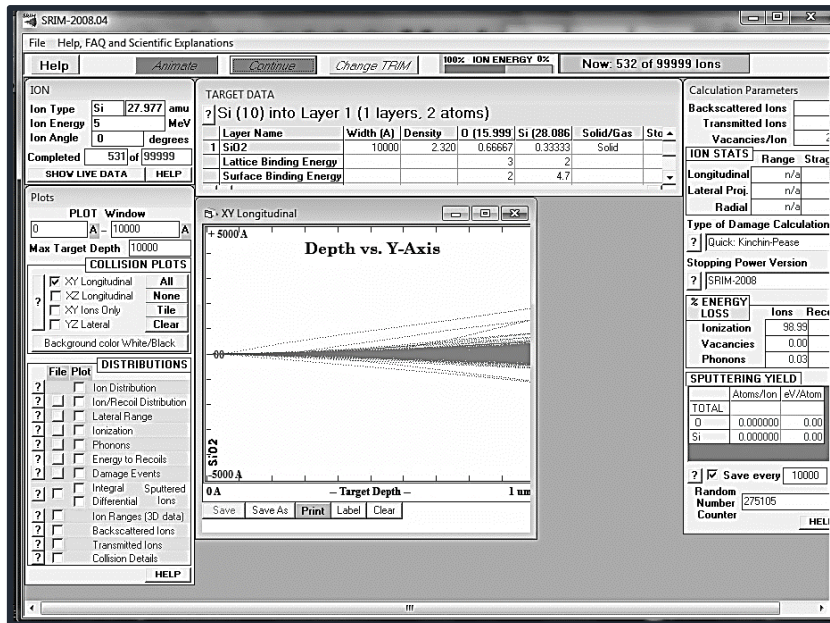


Figura A1.3. Avance de simulación. Gráfico que muestra la trayectoria y el alcance de los iones dentro del material.

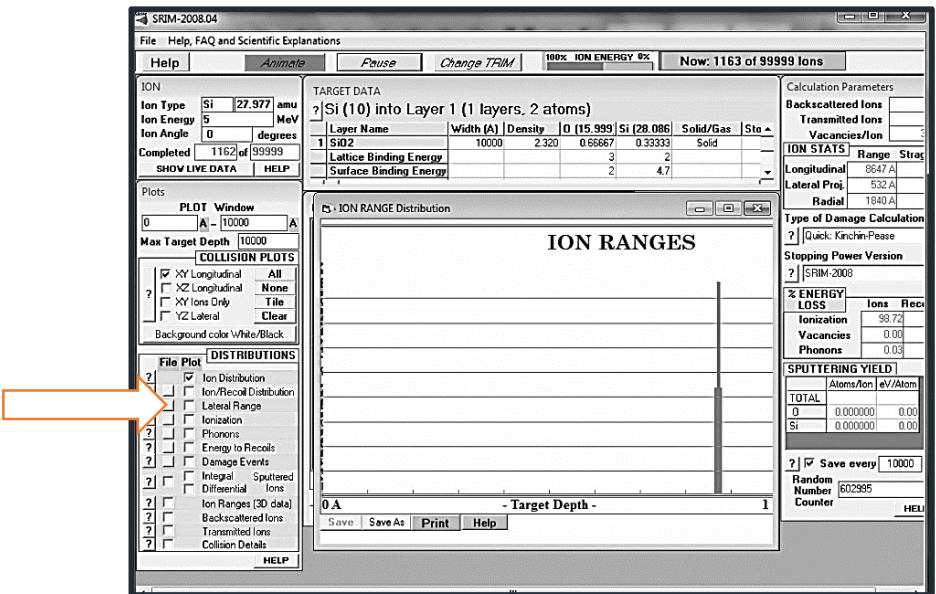


Figura A1.4. Avance de simulación. Gráfico que muestra la distribución de los iones en función de la profundidad de éstos en el material.

Al observar en la gráfica de distribución de iones de silicio en función de la profundidad de éstos en el material (figura A1.4), en la parte superior de la pantalla se selecciona el botón *Pause*. Para incluir la distribución de los iones de plata dentro del mismo material se selecciona la opción *Change TRIM*. Esta opción permite incluir un nuevo ion en la implantación tomando en cuenta las condiciones del experimento anterior (figura A1.5).

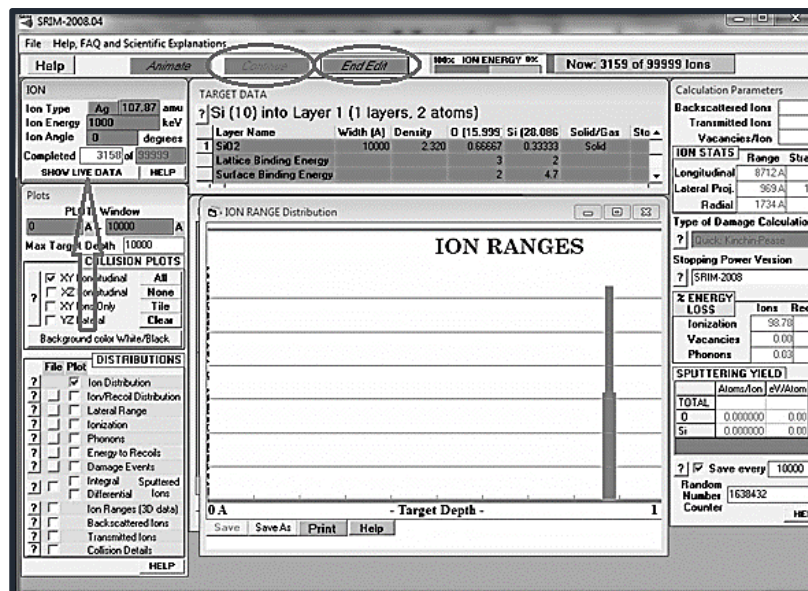


Figura A1.5. Simulación de implantación de iones de plata dentro del material implantado previamente con iones de silicio.

En la parte superior izquierda de la pantalla se selecciona el tipo de ion y la energía del ion que se va a implantar en el material. Teniendo establecidos el ion y la energía a la que se va a implantar, se selecciona el botón *End Edit* y posteriormente el botón *Continue* (figura A1.5) para que la simulación continúe.

Mientras se lleva a cabo la simulación de la implantación de los iones metálicos, se va observando la aparición y crecimiento de otro máximo en la gráfica de distribución de iones en función de la profundidad (figura A1.6). Al observar una distribución normal el programa se detiene dando click en el botón *pause* y la gráfica se guarda como imagen para su posterior análisis.

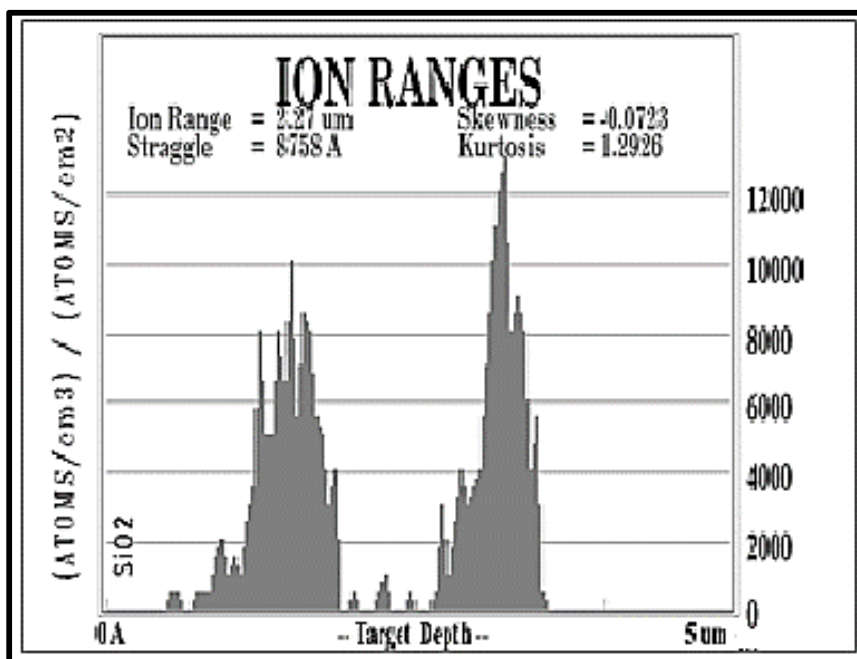


Figura A1.6. Gráfica de distribución de iones en función de la profundidad de implantación en el material.

Apéndice 2

En este apéndice se muestra a detalle el uso del programa SIMNRA para la simulación de los espectros RBS de las muestras y el análisis de los espectros obtenidos experimentalmente.

El programa SIMNRA calcula y simula espectros RBS usando como base una propuesta elemental de la muestra, la calibración y los parámetros experimentales proporcionados; obteniéndose así un espectro RBS teórico, el cual se compara con el experimental, modificando paulatinamente la composición propuesta hasta que los espectros teórico y experimental alcanzan la máxima similitud. En el momento en el que el espectro teórico coincide perfectamente con el espectro simulado se puede determinar la composición de la muestra.

Al inicio, para analizar un espectro RBS es necesario calibrar el sistema de detección, lo cual se realiza utilizando una muestra conocida, así se puede asignar la energía de retrodispersión de cada elemento conocido con un número de canal en el analizador multicanal. Es necesario tener por lo menos dos elementos conocidos para realizar la calibración, pues de ésta se obtiene una relación entre la energía y el número de canal. Cuando se conocen la energía y el número de canal para la muestra conocida se grafica la energía en función del número de canal y así se obtiene una curva de calibración del sistema. Con esta curva de calibración se pueden simular y analizar los espectros RBS de las muestras obtenidos experimentalmente.

En este caso se utilizó dióxido de silicio para calibrar el sistema. Teniendo el espectro RBS para el dióxido de silicio (figura A2.1), se determinó la energía y el número de canal para cada elemento como se describe a continuación, considerando que los elementos más ligeros aparecen del lado izquierdo del espectro y los más pesados del lado derecho de éste.

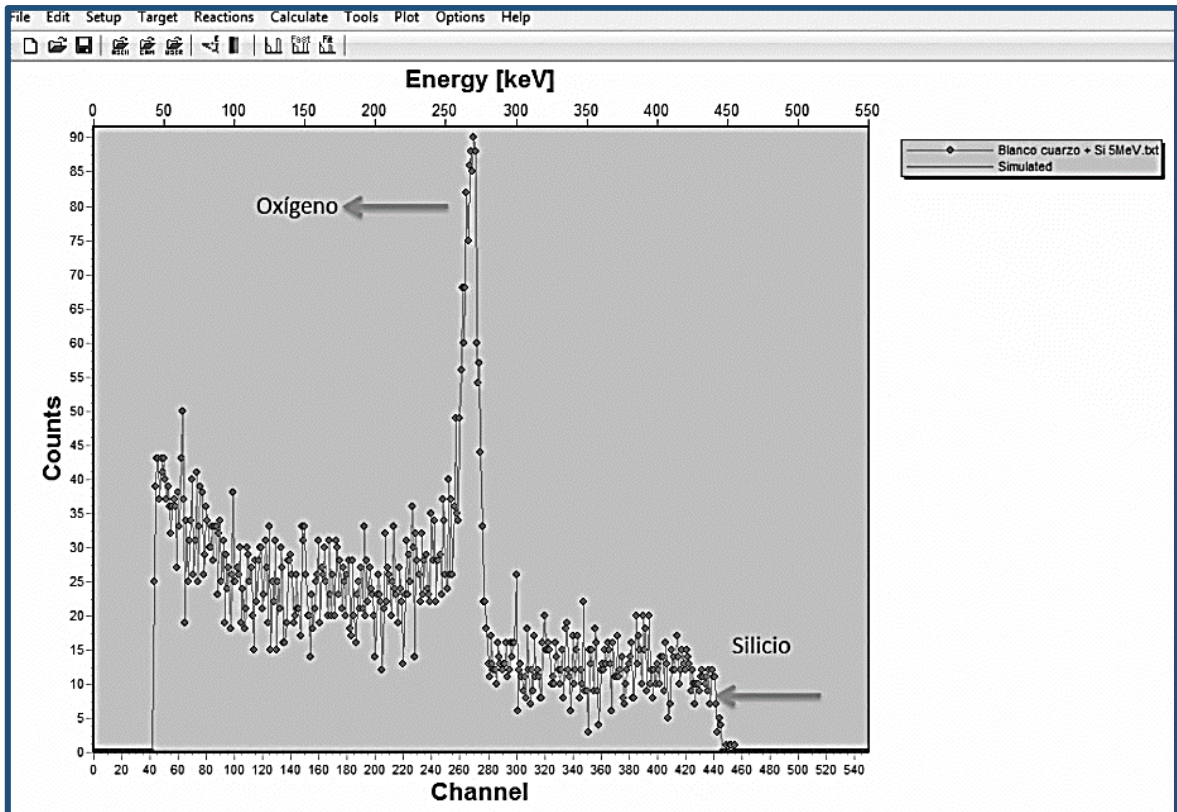


Figura A2.1. Espectro RBS para dióxido de silicio.

Para determinar la energía de cada elemento primero se da click en el botón *Calculate*, de donde se desprende una ventana y se selecciona la opción *Kinematics*. En este momento aparece una venta en la que se ponen las condiciones experimentales, para este caso el ion incidente para realizar la retrodispersión fue He^4 (partículas α) con una energía de 3 MeV y un ángulo de dispersión de 167° . Al seleccionar las condiciones experimentales se puede tener la energía de retrodispersión de cada elemento (figura A2.2).

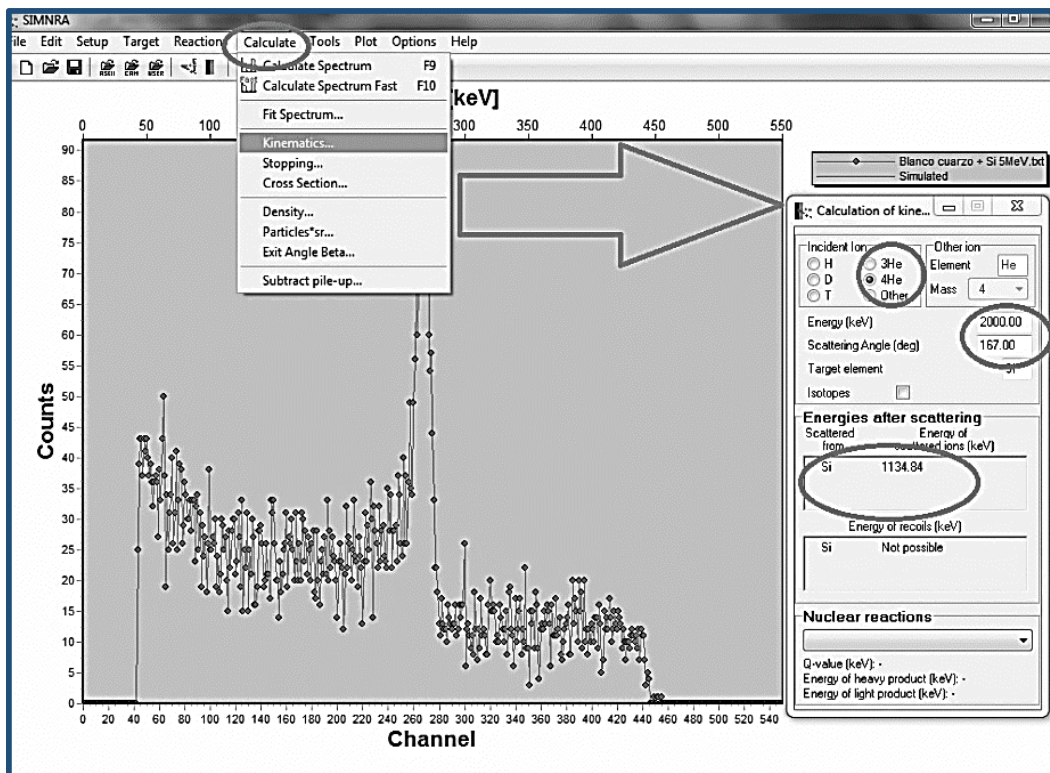


Figura A2.2. Espectro RBS para dióxido de silicio, condiciones experimentales y energía del ion retrodispersado.

Para determinar el canal en el cual se encuentra la señal de un elemento, se selecciona el botón *Tools*; al hacerlo se despliega una ventana y se selecciona la opción *Data reader*, con lo que aparece una ventana la cual muestra el número de canal. Al mismo tiempo en el espectro se posiciona una flecha que indica en el espectro el número de canal. El número de canal para el silicio fue determinado posicionando la flecha a la mitad del escalón, mientras que el número de canal para el oxígeno se determinó posicionando la flecha en el pico (figura A2.3).

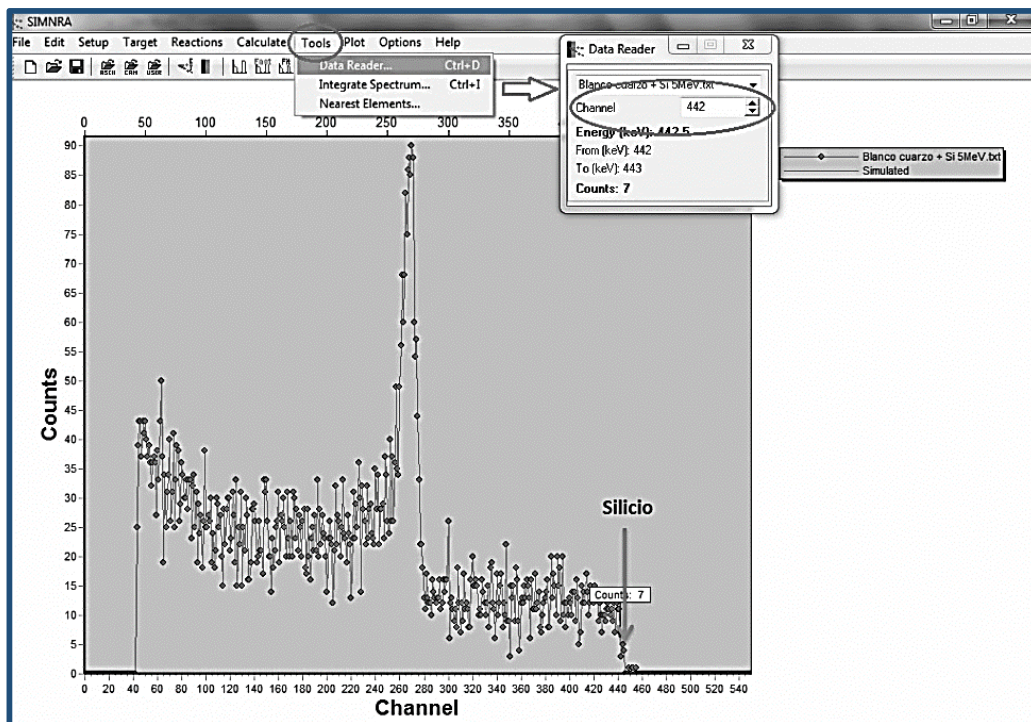


Figura A2.3. Espectro RBS para dióxido de silicio, determinación del número de canal.

Con la energía de retrodispersión de cada elemento y el número de canal se realiza la curva de calibración de la cual la pendiente está dada en unidades de energía por canal y la ordenada al origen en unidades de energía. Con estos datos se tiene calibrado el sistema de detección y es posible iniciar la simulación del espectro RBS. Para ello se inicia seleccionando el botón *Setup*; al desplegarse la ventana, se selecciona la opción *Experiment*; en este momento aparece una ventana en donde se deben poner las condiciones experimentales, así como la pendiente y la ordenada al origen obtenidas anteriormente (figura A2.4).

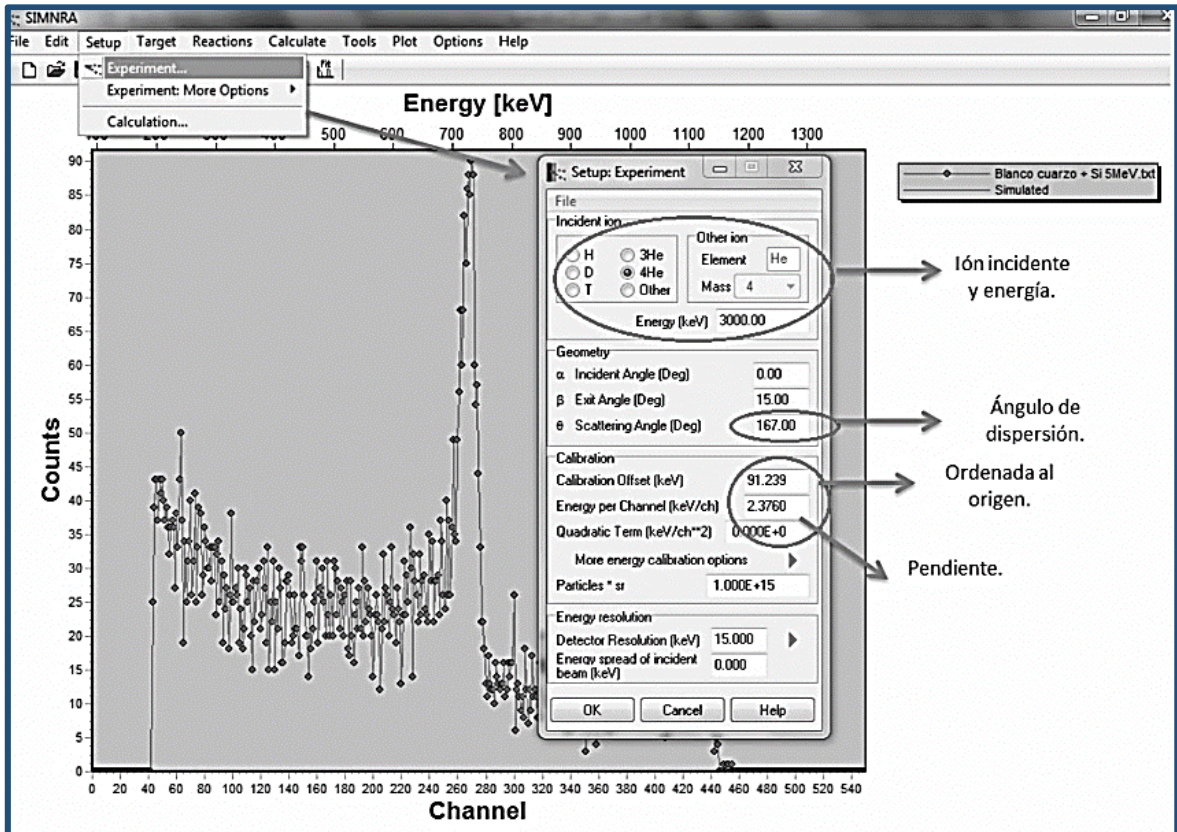


Figura A2.4. Espectro RBS para dióxido de silicio, condiciones de calibración.

Posteriormente se selecciona el botón *Target*, se despliega una ventana y se elige la opción *Target*; es aquí en donde se ingresa la composición teórica de cada elemento en la muestra, así como el espesor de la capa que determina la profundidad y la cantidad de los iones implantados en la muestra. El espesor está dado en unidades de 1×10^{15} átomos/cm², que equivalen a una capa atómica.

También es necesario poner el número de elementos de la capa. Al determinar el número de elementos aparecen los espacio para escribir los elementos y la concentración, que al sumarse deber ser la unidad. Este proceso se repite para cada capa (figura A2.5).

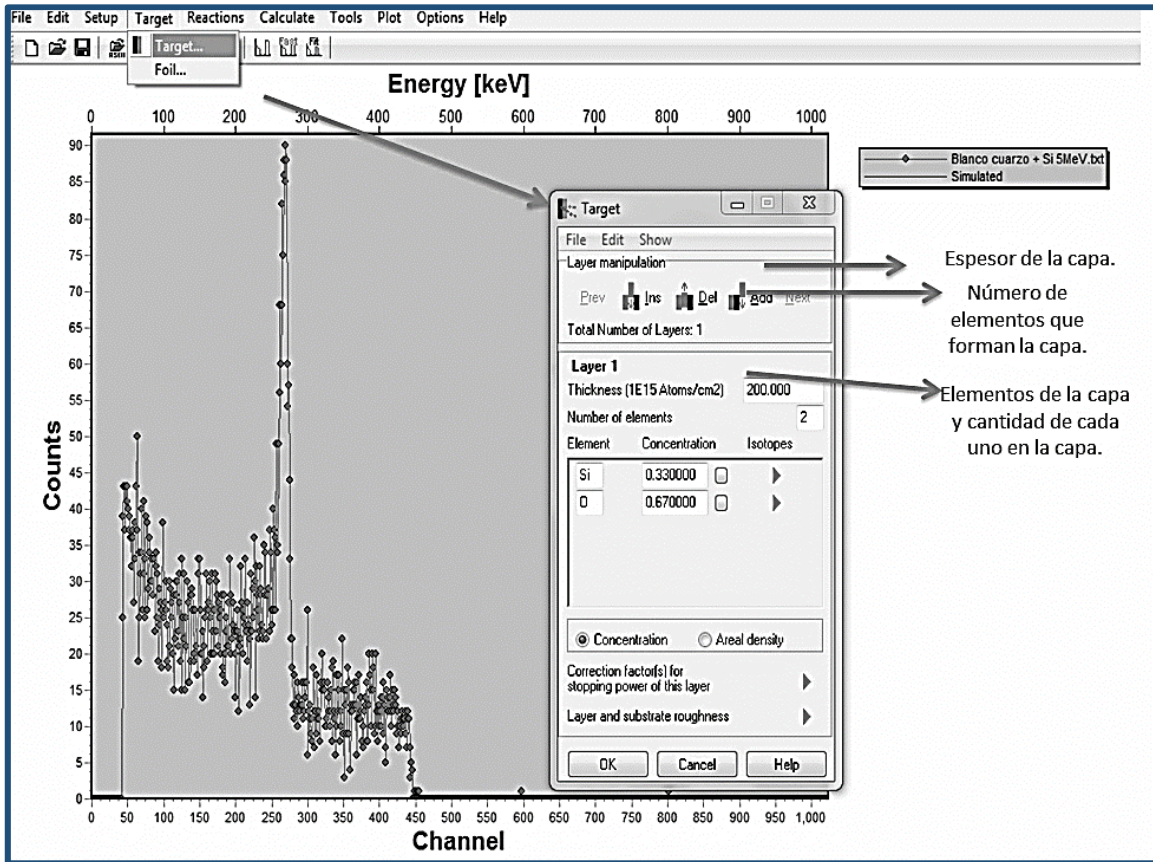


Figura A2.5. Espectro RBS para dióxido de silicio, establecimiento de composición teórica de cada elemento en la muestra.

Una vez establecidas todas las capas, se comparan los datos teóricos (composición, concentración) introducidos en el sistema con los datos experimentales. Se selecciona el botón *Calculate*, se despliega una ventana y se selecciona la opción *Calculate Spectrum*. A continuación aparece una ventana en la cual se muestran las reacciones nucleares que se producen entre el ion incidente y cada uno de los elementos de la muestra (figura A2.6).

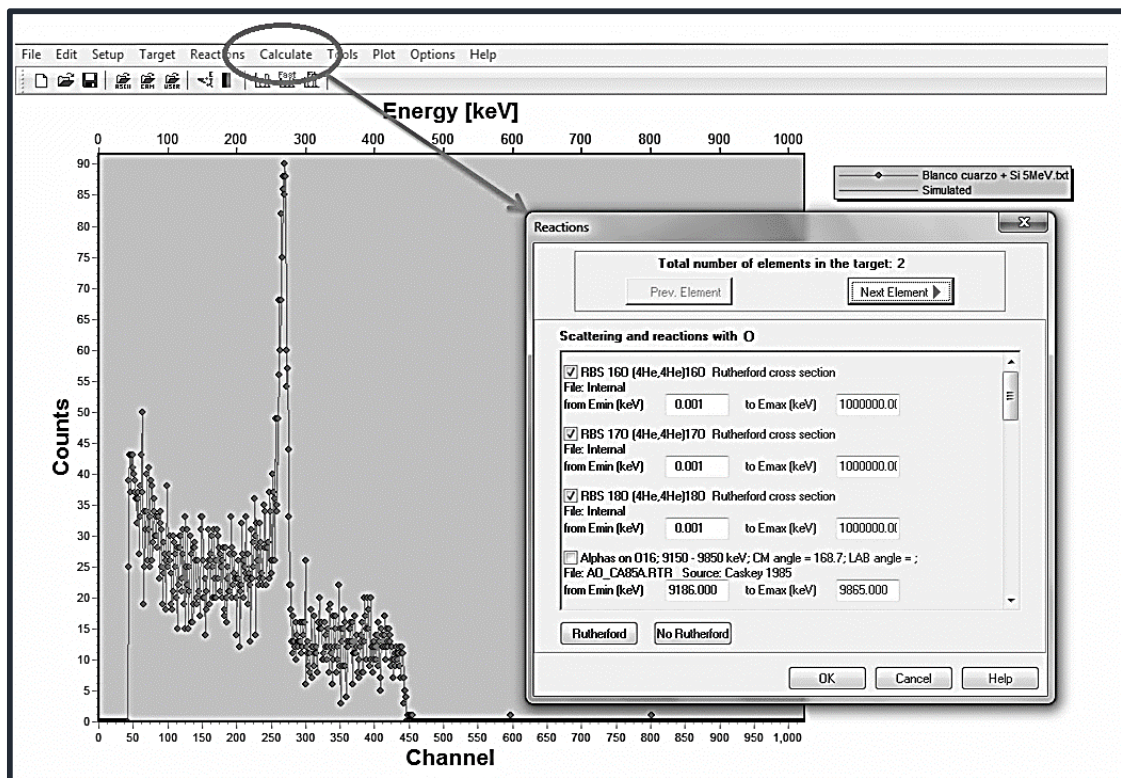


Figura A2.6. Espectro RBS para dióxido de silicio, selección de las reacciones nucleares del ion incidente con los elementos de la muestra.

Al seleccionar las reacciones para cada elemento aparece en el espectro una línea continua sobre la línea original del espectro RBS, la cual representa el espectro simulado (figura A2.7).

Si el espectro teórico coincide con el experimental, el espectro ha sido simulado correctamente y las concentraciones de cada capa corresponderán a la composición de la muestra.

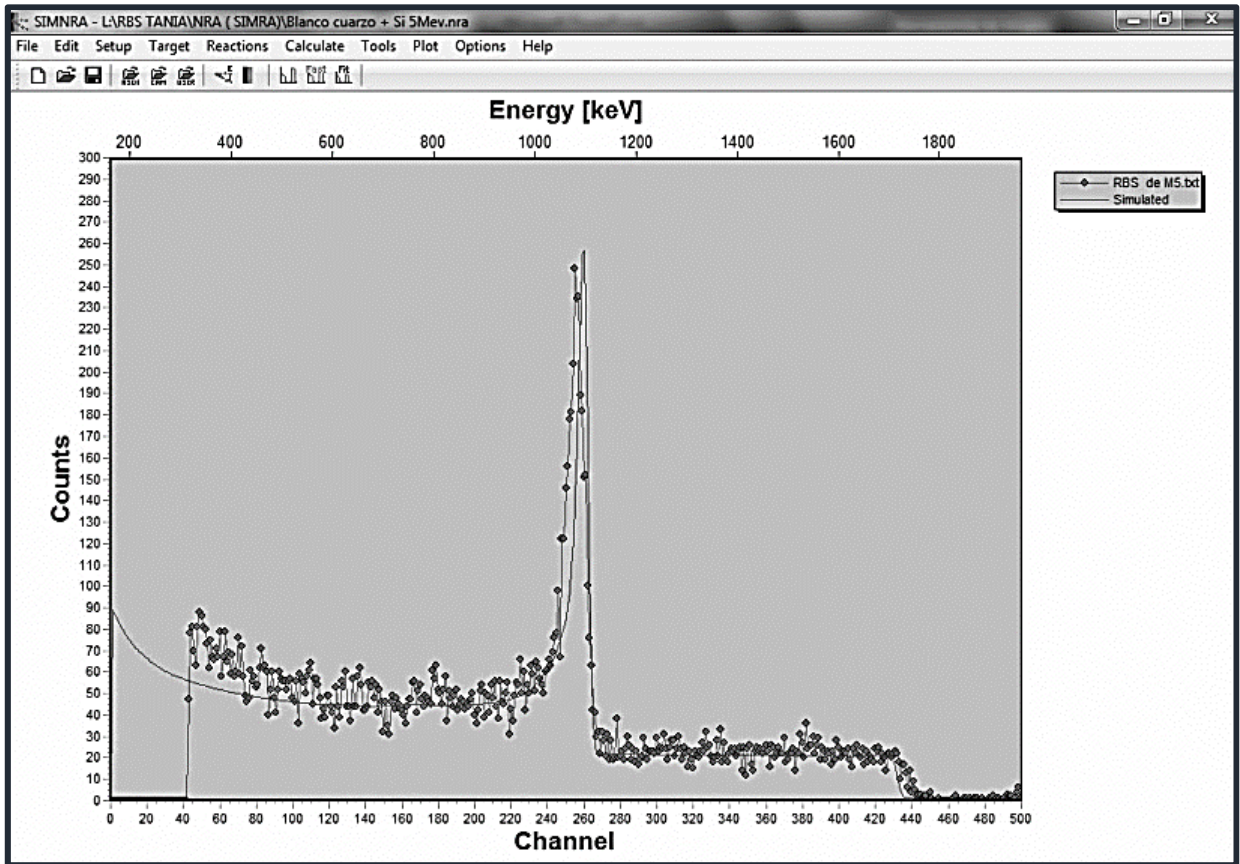


Figura A2.7. Espectro RBS para dióxido de silicio. Espectro teórico simulado (línea continua).

Si no hay coincidencia, se deben cambiar los parámetros de calibración (figura A2.4), la composición de los elementos en cada capa o el espesor de las capas (figura A2.5) y deben seleccionarse adecuadamente las reacciones nucleares asociadas a la interacción del ion incidente con los elementos de la muestra (A2.6) hasta hacer coincidir el espectro teórico con el experimental, y así tener un espectro simulado correctamente, lo que permitirá determinar el perfil de concentración en función de la profundidad de implantación de los iones en la muestra.

Apéndice 3.

En éste apéndice se trata con detalle el cálculo del perfil de concentración en función de la profundidad de los iones implantados en la muestra. Para esto es necesario haber realizado el análisis y la simulación de los espectros RBS utilizando el programa SIMNRA, como se mostró en el apéndice 2.

Posterior a la simulación de los espectros RBS se obtienen los datos del número de capas utilizadas en la simulación, el espesor de cada capa y la concentración de los elementos en cada capa. Con estos datos se determina la profundidad de la implantación de los iones y la cantidad de iones implantados.

En la siguiente tabla se muestran los parámetros obtenidos para una muestra analizada.

Tabla A3.1. Cálculo del perfil de concentración para la muestra irradiada con iones de plata a 1 MeV.

Ag 1MeV: Blanco SiO2 + Si 5 MeV										
Ion = Si Energy = 5000 keV Layer 1: SiO2 Layer width = 5.E+04 A. Layer # 1- Density = 6.375E22 atoms/cm3 = 2.32 g/cm3 Layer # 1- O = 66.6 Atomic Percent = 53.2 Mass Percent Layer # 1- Si = 33.3 Atomic Percent = 46.7 Mass Percent										
Gráfica										
Número de capa	Espesor [1E+15 átomos/cm ²]	Profundidad	Concentración %			Cantidad de plata		Profundidad [1E+15 átomos/cm ²]	Profundidad [µm]	
			Ag	Si	O	1E+15 átomos/cm ²	% atómico			
1	100	100	0	0.3	0.7	0	0	50	0.0071685	
2	60	160	0.04	0.28	0.68	2.4	4	110	0.0157706	
3	60	220	0	0.3	0.7	0	0	170	0.0243728	
3	1200	1420	0	0.3	0.7	0	0	1370	0.1964158	
4	250	1670	0.01	0.31	0.68	2.5	1	1620	0.2322581	
5	250	1920	0.01	0.31	0.68	2.5	1	1670	0.2681004	
6	250	2170	0.012	0.308	0.68	3	1.2	2120	0.3039427	
7	250	2420	0.012	0.308	0.68	3	1.2	2370	0.3397849	
8	250	2670	0.025	0.3	0.675	6.25	2.5	2620	0.3756272	
9	250	2920	0.318	0.32	0.65	79.5	31.8	2870	0.4114695	
10	250	3170	0.04	0.315	0.645	10	4	3120	0.4473118	
11	250	3420	0.08	0.32	0.6	20	8	3370	0.4831541	
12	250	3670	0.008	0.308	0.684	2	0.8	3620	0.5183964	
13	250	3920	0.008	0.308	0.684	2	0.8	3870	0.5548387	
14	250	4170	0.008	0.308	0.684	2	0.8	4120	0.590681	
15	250	4420	0.004	0.308	0.688	1	0.4	4370	0.6265233	
16	80000	84420	0	0.3	0.7	0	0	84370	12.036057	
			Ag total [1E15 átomos/cm ²]			136.15				
			Ag total %			57.5				

De la tabla A3.1, las dos primeras columnas representan los datos extraídos directamente de la simulación utilizando el programa SIMNRA.

Para determinar la profundidad, a partir de la capa número dos, al espesor de cada capa se le sumó el espesor de la capa anterior. Por ejemplo: la celda C13 es igual a la suma de la celda C12 más la celda B13.

La densidad areal de plata (átomos de plata/cm²) (columna G), fue obtenida multiplicando el espesor de cada capa (columna B), por la concentración de iones de plata (columna D). Por ejemplo: la celda G12 es igual a la celda B12 por la celda D12.

Para determinar el porcentaje atómico de plata se multiplicó el valor de la concentración de plata extraído de la simulación con el programa SIMNRA por el valor de 100. Por ejemplo: la celda H12 es igual a la celda D12 por 100.

La profundidad en átomos por centímetro cuadrado fue determinada al sumar el espesor de cada capa con la profundidad de la capa anterior. La mitad de la profundidad de la primera capa se coloca en la celda I12, para la celda I13 se suma el valor de la celda I12 más el espesor de la segunda capa, en este caso la celda B13.

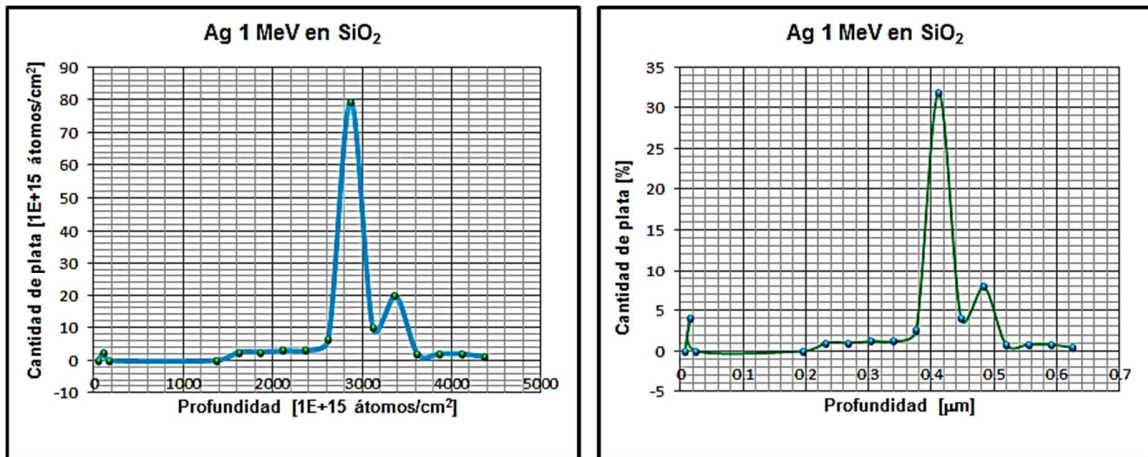
Finalmente la profundidad en micras se calculó utilizando la siguiente ecuación:

$$Profundidad [\mu m] = \frac{[Profundidad(\frac{\text{átomos}}{cm^2})]*[1E+14]*[1E+3]}{\rho \text{ de } SiO_2} \quad (A3.1)$$

Por ejemplo, para la celda J12:

$$Profundidad [\mu m] = \frac{[(I12*(\frac{\text{átomos}}{cm^2}))]*[1E+15]*[1E+3]}{6.98 E+22} \quad (.A3.2)$$

Finalmente se graficó (figura A3.1).la concentración de plata en átomos/cm² en función de la profundidad en átomos /cm² y el porcentaje atómico.



(a)

(b)

Figura A3.1. Gráfica de cantidad de plata en (a) átomos por unidad de área y (b) porcentaje atómico

Apéndice 4.

En este apéndice se describe detalladamente el tratamiento de los datos para determinar la fotoluminiscencia como respuesta óptica de las muestras.

En el experimento, con el láser de Kr-F, se midió primero la respuesta óptica del medio en el cual se realizarían todos los experimentos. Las mediciones para el medio, el blanco y las muestras se realizaron a diferentes longitudes de onda: 380, 515, 660, 795 y 930 nm. Los valores obtenidos de la respuesta óptica para el medio en el que se realizó el experimento fueron nombrados como *fondo*.

Por otro lado, tuvo que considerarse la calibración del láser para las condiciones de trabajo, tomando en cuenta la intensidad de la lámpara determinada por el fabricante y la intensidad medida en las condiciones experimentales, así como el monocromador. Estos datos fueron denominados como respuesta espectral. Los datos de la intensidad de la lámpara proporcionados por el fabricante no corresponden a todos los valores de longitud de onda medidos durante el experimento, así que fue necesario realizar una extrapolación para obtener un valor de la respuesta espectral para cada uno de los valores de longitud de onda del experimento. Esto se llevó a cabo gráficamente y determinando una ecuación para describir el comportamiento de los datos.

Los datos se analizaron por regiones de longitud de onda. Así para cada región (380, 515, 660, 795 y 930 nm) existen datos de respuesta óptica de la muestra, de fondo y de respuesta espectral. Para obtener la relación entre la respuesta óptica en función de la longitud de onda para cada una de las muestras deben ser considerados los factores descritos anteriormente; así se obtendrá la respuesta óptica de la muestra para cada región de longitud de onda sin considerar factores del medio en el que se realizó el experimento, ni factores del equipo con el cual se llevó a cabo el experimento.

A continuación se muestra la tabla de manejo de resultados para el blanco en la región de 380 nm.

Tabla A4.1. Respuesta óptica del blanco en la región de 380 nm.

	A	B	C	D	E	F	G
1	Región 380						
2							
3							
4	λ [nm]	Respuesta Sin Corrección	Fondo 380	Resta de fondo	Normalizar	Respuesta Espectral	Respuesta final
5	295.035	389193	337765	51428	0.10298535	1.324455313	0.136399493
6	295.201	387541	337804	49737	0.099599096	1.324455313	0.131914552
7	295.368	396271	350411	45860	0.091835345	1.324455313	0.121631811
8	295.534	396080	340576	55504	0.111147601	1.324455313	0.147210031
9	295.7	401292	342912	58380	0.116906835	1.324455313	0.154837879
10	295.866	392266	342754	49512	0.099148531	1.324455313	0.131317798
11	296.033	387203	335227	51976	0.104082728	1.324455313	0.137852922
12	296.199	400564	346013	54551	0.109239204	1.324455313	0.144682445
13	296.365	391908	346246	45662	0.091438847	1.324455313	0.121106667
14	296.531	385578	336288	49290	0.098703972	1.324455313	0.130729
15	296.698	389791	335971	53820	0.107775366	1.324455313	0.142743656
16	296.864	395700	334724	60976	0.122105364	1.324455313	0.161723098
17	297.03	413283	351720	61563	0.123280841	1.324455313	0.163279964
18	297.197	399126	339522	59604	0.119357914	1.324455313	0.158084223
19	297.363	406657	342502	64155	0.12847136	1.324455313	0.170154575
20	297.529	411735	347039	64696	0.129554721	1.324455313	0.171589438
21	297.695	402899	341360	61539	0.12323278	1.324455313	0.163216311
22	297.862	411449	342937	68512	0.137196319	1.324455313	0.181710393
23	298.028	396433	336983	59450	0.119049526	1.324455313	0.157675777

En la columna A se encuentran los valores de longitud de onda en nanómetros y en la columna B los valores de respuesta óptica de la muestra correspondientes a cada longitud de onda sin modificación. En la columna C se muestran los valores de respuesta óptica medidos para el fondo, mientras que en la columna D se presentan los datos obtenidos de la diferencia entre la respuesta óptica para la muestra y la del fondo. Por ejemplo: la celda D5 es igual a la celda B5 menos la celda C5.

En la columna E se presentan los valores de la respuesta óptica de la muestra, eliminando la respuesta del fondo, normalizada a 500 nm. En la columna F están los valores de la respuesta espectral, de igual manera normalizada a 500 nm. Por último, en la columna G se muestra la respuesta neta de la muestra para cada valor de longitud de onda. Este valor se obtuvo multiplicando la respuesta

espectral normalizada por la respuesta de la muestra normalizada. Por ejemplo: la celda G5 es igual es igual a la celda F5 multiplicada por la celda E5.

Este procedimiento se aplicó para todas las regiones de longitud de onda, al final se graficó la respuesta neta de la muestra de todas las regiones en función de la longitud de onda (figura A4.1). El mismo procedimiento se aplicó para el análisis de los resultados de respuesta óptica para cada muestra medida.

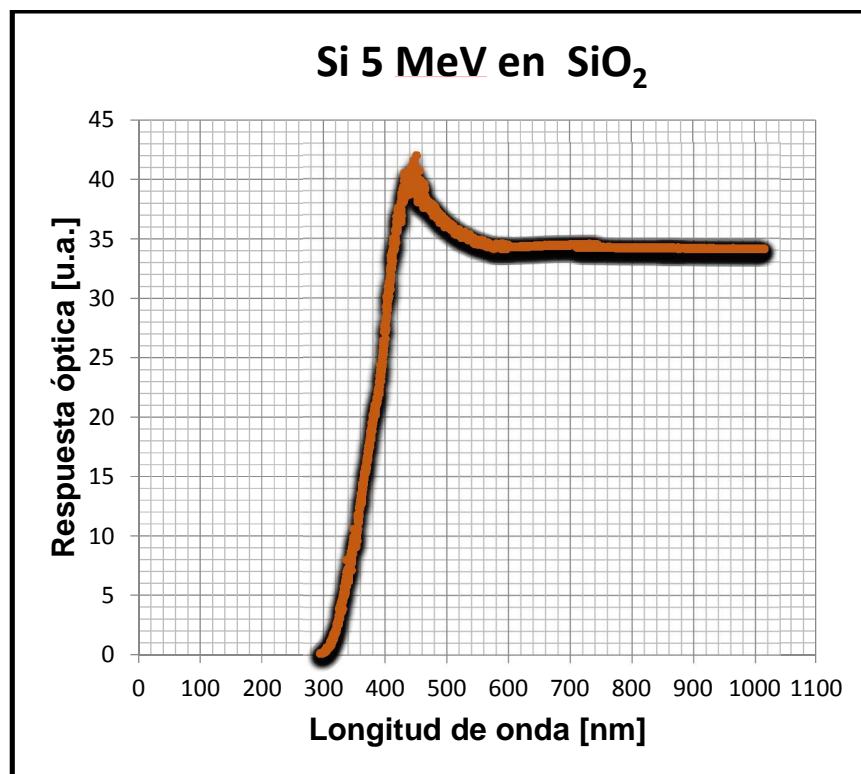


Figura A4.1. Respuesta óptica en función de la longitud de onda para el blanco: Si 5 MeV en dióxido de silicio.